

A. Ziegler

Frankfurt a.M. 1981

Der Charakter des ferromagnetischen Phasenübergangs bei Ni

Inaugural-Dissertation

zur

Erlangung des Doktorgrades der Naturwissenschaften

vorgelegt beim Fachbereich Physik

der

Johann Wolfgang Goethe-Universität

zu Frankfurt am Main

von

Alfred Ziegler

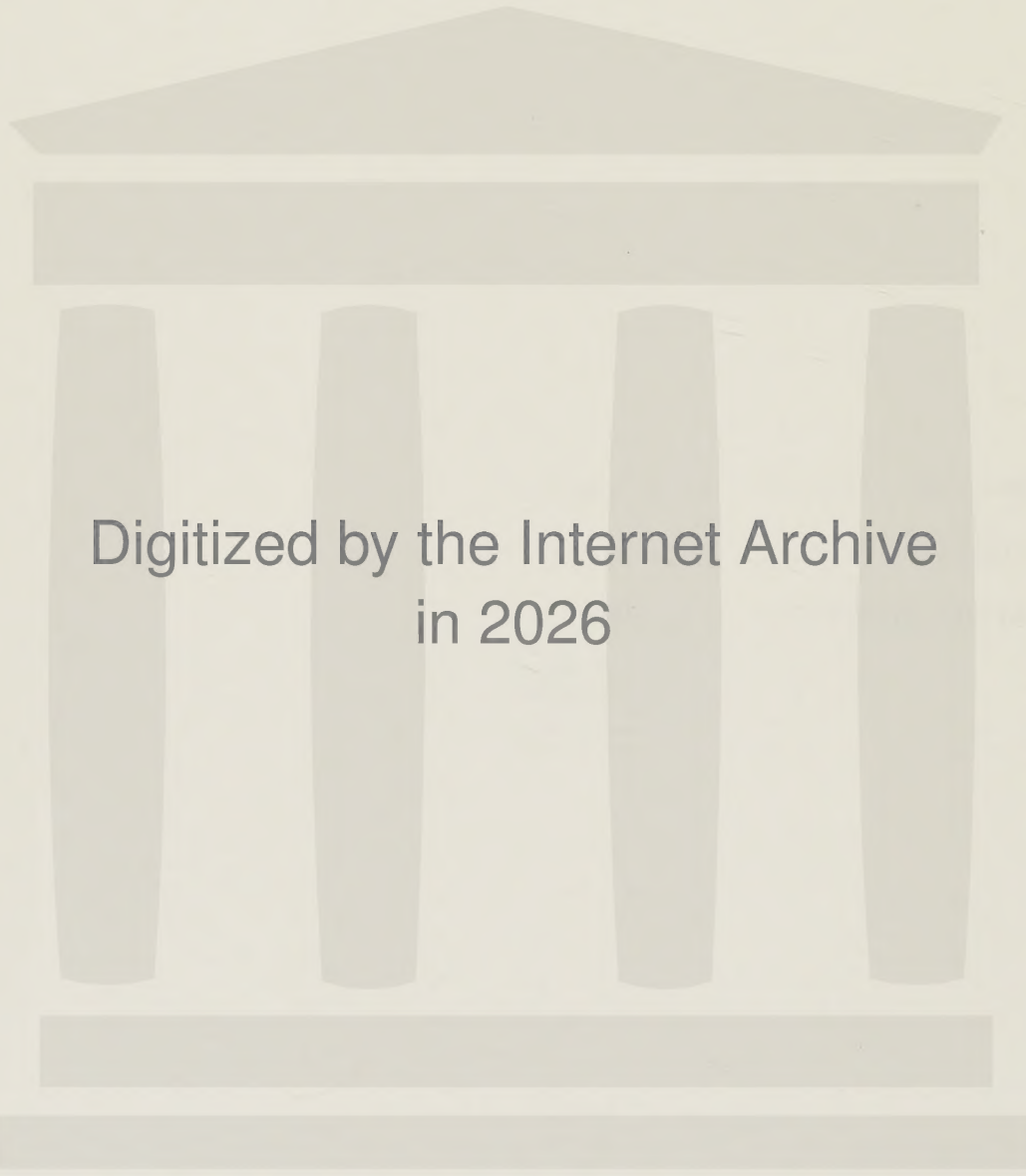
aus Frankfurt am Main

1981



Gedruckt mit Genehmigung des Fachbereichs Physik der Universität Frankfurt a.M.

1. Gutachter: Prof. Dr. R. J. Jelitto
2. Gutachter: Prof. Dr. L.L. Hirst
3. Tag der Promotion: 11.12.1981



Digitized by the Internet Archive
in 2026

https://archive.org/details/IA41550820_0047

Gedruckt mit Genehmigung des Fachbereichs Physik der Universität Frankfurt a.M.

1. Gutachter: Prof. Dr. R. J. Jelitto
2. Gutachter: Prof. Dr. L.L. Hirst
3. Tag der Promotion: 11.12.1981

I. Einleitung

1. Problemstellung
2. Aufbau der Arbeit

II. Begründung des Hamiltonoperators

1. Adiabatische Entkopplung von Freiheitsgraden
2. Entkopplung von Freiheitsgraden bei den ferromagnetischen 3d-Metallen
3. Begründung der Heisenbergkopplung
4. Bestimmung des Kopplungsparameters aus der magnetischen potentiellen Energie
5. Der Clusterhamiltonoperator

III. Eigenschaften der Transportclusternäherung

1. Transportclusternäherung am Beispiel des Andersonmodells
2. Bedeutung realer Transportprozesse für die Clusterkopplung
3. Das Problem künstlicher Phasenkohärenz

IV. Berechnung von $\Delta E(\phi)$ und kT_c

1. Berechnung des lokalen Bandes
2. Berechnung von μ und $|\gamma_\sigma|^2$
3. Berechnung der $\gamma_\sigma(\phi)$
4. Berechnung der kritischen Temperaturen

V. Diskussion der Ergebnisse

Anhang

Abbildungen

Literatur

I. E i n l e i t u n g

1. Problemstellung

Das magnetische Verhalten der Übergangsmetalle Eisen, Kobalt und Nickel zu verstehen, ist eine physikalische Fragestellung, die auch 50 Jahre, nachdem Heisenberg [1] erstmals gezeigt hat, wie die Größenordnung der Austauschkopplung zu erklären ist, noch Gegenstand intensiver Untersuchungen ist. Die Komplexität dieser Materie kann man sich vergegenwärtigen, wenn man die historische Entwicklung verfolgt. Nachdem einmal, hauptsächlich durch die Arbeiten von van Vleck [2], geklärt war, wie durch intraatomaren Austausch die Bildung von magnetischen Momenten an einzelnen Atomen zustande kommt, versuchte man, Ferromagnetismus durch die Austauschkopplung zwischen den Momenten benachbarter Atome zu deuten, die durch den Überlapp der atomaren Wellenfunktionen bedingt ist. Man stellte sich vor, daß die sp-Elektronen der Übergangsmetalle und seltenen Erden für die metallischen Eigenschaften, die als lokalisiert gedachten d-Elektronen bzw. f-Elektronen für die magnetische Kopplung verantwortlich seien. Allerdings zeigte sich schnell, daß einige Eigenschaften der Metalle mit dieser Vorstellung unvereinbar waren: so sind die magnetischen Momente von Fe, Co und Ni nicht ganzzahlig, was ebenso wie die große spezifische Wärme ein Indiz dafür ist, daß die d-Elektronen nicht lokalisiert sind, während die f-Elektronen so gut lokalisiert sind, daß es praktisch keinen Überlapp gibt. Daraufhin begründeten J. Slater und F. Bloch durch eine energetische Abschätzung die Bandtheorie des Ferromagnetismus: die völlig delokalisierten Elektronen unterliegen nun einer Austauschwechselwirkung seitens aller Elektronen im Kristall. Dadurch, daß die Elektronen ihre Spins parallel stellen, kann Energie gewonnen werden: das Paulische Ausschließungs-

prinzip (das auch Ursache der Austauschkopplung ist) verhindert ohne energetische Kosten die Annäherung von Elektronen gleichen Spins, während Elektronen verschiedenen Spins, die im Bandbild unkorreliert sind, sich beliebig nahe kommen und dadurch eine starke Coulomb - Abstoßung verspüren. Allerdings steht dem ein Energieverlust gegenüber, der dadurch entsteht, daß die Elektronen durch Parallelstellung der Spins Zustände höherer kinetischer Energie einnehmen müssen. Bloch [3] konnte zeigen, daß die sp-Bänder der einfachen Metalle viel zu breit sind (d.h. hohe kinetische Energie haben!), um Ferromagnetismus zu ermöglichen, für die schmalen d-Bänder aber ist die Grundannahme der Bandtheorie, daß man potentialbedingte Korrelationen zwischen den Elektronen vernachlässigen kann, unzulässig. Außerdem ist die Bandtheorie nicht in der Lage, die experimentell gefundene Curie-Weiß-Suszeptibilität zu erklären. Die darauf folgenden Jahrzehnte erlebten eine manchmal recht heftige Auseinandersetzung zwischen den Vertretern des lokalisierten oder Heisenbergmodells und des hauptsächlich von Stoner [4] weiterentwickelten Bandmodells. Nach dem zweiten Weltkrieg erfuhr die Festkörperphysik durch die im Krieg erzielten technischen Fortschritte und den damit verknüpften neuen experimentellen Möglichkeiten einen rasanten Aufschwung. . Erstmals konnten durch Mikrowellen- und Neutronenstreuexperimente die von Bloch [5] für das Heisenbergmodell vorhergesagten Spinwellen sowohl bei den magnetischen Seltenen Erden wie bei Fe, Co und Ni nachgewiesen werden. Durch Zeners [6] Konzept des indirekten Austausches, bei dem die lokalisierten f-Elektronen die sp-Leitungselektronen polarisieren und damit indirekt an die f-Elektronen der nächsten Nachbarn koppeln, war der Weg freigelegt für das Verständnis des Magnetismus in den durch Speddings Ionenaustauschtechnik erstmals rein vorliegenden Seltenen Erden.

1963 entwickelte Hubbard [7], ausgehend von seinen Arbeiten zur Korrelation im Elektronengas, gleichzeitig mit Kanamori [8] und Gutzwiller [9] ein Modell, das zwischen dem Bandmodell und dem atomaren oder lokalisierten Modell interpoliert, also für den Fall schmaler Bänder mit starken Korrelationseffekten gültig sein sollte. Mit diesem Modell waren zum ersten Mal die zugrundeliegenden physikalischen Verhältnisse in einen Hamiltonoperator umgesetzt worden, was eine explosionsartig wachsende Anzahl von Arbeiten auslöste, die versuchten, die physikalischen Eigenschaften dieses Modells auszurechnen. Diese Begeisterung ebte nach einigen Jahren wieder ab, weil sich herausstellte, daß man mit den bekannten mathematischen Methoden auch nur die beiden Grenzfälle - Bandmodell und lokalisiertes Modell - zufriedenstellend behandeln konnte. Man erkannte, daß es wichtig war, eine Vorstellung von den physikalischen Lösungen bzw. den relevanten Freiheitsgraden zu gewinnen, bevor man mathematisch etwas berechnen konnte. Wenn das aber nötig war, kam es auf das konkrete Modell nicht mehr entscheidend an und das Interesse am Hubbardmodell begann zu schwinden.

Welches sind nun die entscheidenden Freiheitsgrade? Im Bandmodell gibt es als einzige Freiheitsgrade die Einteilchenanregungen, die ein Elektron auf ein höheres Niveau im Band heben. Da die den Niveaus zugeordneten Zustände völlig delokalisiert sind, bedeutet das, daß der ganze Kristall ein einziges starres magnetisches Moment darstellt. Das ist unrealistisch: sowohl aus dem Erhaltungssatz der Gesamtmagnetisierung wie aus der gebrochenen Symmetrie folgt die Existenz von kollektiven Anregungen, d.h. von Freiheitsgraden, die durch Inhomogenitäten der Magnetisierungsdichte gekennzeichnet sind und deren Dynamik durch den Ausgleich dieser Inhomogenität bestimmt wird. Anregungen dieser Art sind aus dem

Heisenbergmodell gut bekannt. Das Problem, das hier auftritt, ist, daß beide Arten von Anregungen, elektronische wie kollektive, miteinander gekoppelt sind. Im Falle eines halbgefüllten Bandes kann man zeigen, daß bei genügend starker Korrelation eine Bandaufspaltung eintritt, so daß das System zum Isolator wird und die Einzelteilchenanregungen wegen der Bandlücke wesentlich höher liegen als die kollektiven Freiheitsgrade, d.h. der Isolator verhält sich dann wie ein Heisenbergmodell mit antiferromagnetischem Austausch ([10] - [14]). Bei nicht halbgefüllten Bändern, wie das bei den d-Bändern der Übergangsmetalle auf Grund der Hybridisierung mit den sp-Bändern der Fall ist, ist diese Entkopplung nicht möglich. In diesem Zusammenhang ist es wichtig, zu erwähnen, daß die Frage der Freiheitsgrade und ihrer Wechselwirkung entscheidend ist für die Thermodynamik des Systems, relativ unbedeutend hingegen für den Grundzustand. Da die kollektiven Freiheitsgrade Bosonencharakter haben, sind ihre Besetzungszahlen gegeben durch $n_k = [e^{\beta(\omega_k - \mu)} - 1]^{-1}$. Weil für die kollektiven Anregungen keine Teilchenzahlerhaltung gilt, ist $\mu = 0$. Wegen $\omega_k > 0$ ist für den Grundzustand ($\beta = \infty$) $n_k = 0$, d.h. im Grundzustand spielen die kollektiven Anregungen keine Rolle. Sie machen sich höchstens als virtuelle Bosonen oder Nullpunktsfluktuationen bemerkbar [15]. Mit anderen Worten: der Grundzustand kann mit einem Bandmodell, dessen Parameter geeignet gewählt wurden, beschrieben werden. Der entscheidende Gedanke, wie die Parameter eines solchen Bandhamiltonoperators zu bestimmen seien, stammt von Slater [16], bekannt unter dem Namen $X\alpha$ -Methode. Er hatte das in der Hartree-Fock-Gleichung auftretende nicht-lokale Austauschpotential durch ein lokales ersetzt: $V_\sigma(\underline{r}) = -3e^2 \times \alpha (3\rho_\sigma / 4\pi)^{1/3}$, $\alpha = 1$. Eine theoretische Begründung ergab sich aus dem Hohenberg-Kohn-Theorem [17], das zeigt, daß sich die Grundzustandsenergie exakt als ein allerdings nichtlokales Funktional der

Spindichten darstellen läßt. Kohn, Sham [18] und Gaspar [19] zeigten, daß sich mit einer lokalen Approximation des Funktional's ein Austauschpotential der obigen Form, allerdings mit $\alpha = 2/3$ ableiten läßt. Von Barth und Hedin [20] verbesserten die Theorie, indem sie die Eigenschaften des homogenen Elektronengases, auf das die lokale Approximation führt, anders auswerteten als Kohn und Sham, wodurch sich eine andere funktionelle Abhängigkeit des Potentials $V_{\sigma}(\underline{r})$ von ρ_{σ} ergab. Mit Hilfe dieser Methode können praktisch alle Grundzustandseigenschaften zuverlässig berechnet werden, u.a. auch die magnetischen Eigenschaften der Übergangsmetalle. So konnte erklärt werden, warum Eisen, Kobalt und Nickel magnetisch sind und andere d-Metalle nicht; die berechnete Grundzustandsmagnetisierung bzw. die magnetische Suszeptibilität bei $T=0$ und andere Größen stimmen sehr genau mit den Messungen überein. Eine mögliche Ausnahme bildet die Austauschspaltung und Bandbreite von Ni: die gemessenen Werte sind wesentlich kleiner als die berechneten, wobei noch nicht geklärt ist, ob es sich tatsächlich um eine Unzulänglichkeit der Spindichtefunktionalmethode oder einer unzulässigen Interpretation der Messungen (Vernachlässigung von final-state-effects) handelt. Bei Berechnung thermodynamischer Eigenschaften versagt diese Methode allerdings, zumindest in der angegebenen Form. Es wird später deutlich werden, daß der in dieser Arbeit vorgeschlagene Ansatz eine gewisse Ähnlichkeit mit der local-spin-density-Methode hat.

Man stand also vor dem Problem, elektronische Anregungen und z.B. Spinwellen gleichzeitig zu behandeln. 1963 war es Izuyama, Kim und Kubo [21] zum ersten Mal mit Hilfe der Random-Phase-Approximation (RPA) gelungen zu zeigen, daß im Hubbardmodell Spinwellen möglich sind und zwar longitudinale Spinwellen, die als kollektiver Freiheitsgrad durch Spindichteinhomogenitäten entstehen. Damit

war auch gezeigt, daß die experimentell gefestigte Existenz von Spinwellen kein Beweis für den lokalen Charakter des Systems ist, denn im Heisenbergmodell sind die Spinwellen transversal. Allerdings sind die von Izuyama, Kim und Kubo berechneten Spinwellen Anregungen auf einem Grundzustand, der ausschließlich mit Einteilchenanregungen bestimmt wurde, während in Wirklichkeit thermisch angeregte Spinwellen und elektronische Anregungen die freie Energie bestimmen. Es galt also, selbstkonsistent die Renormierung des Gleichgewichtszustands durch die Spinwellen und die Modifikation der Spinwellen durch den veränderten Gleichgewichtszustand zu bestimmen. Diese wechselseitige Abhängigkeit läßt sich ausdrücken als eine Form von Mode-Mode-Kopplung: Spinwellen modifizieren die elektronischen Niveaus und diese wiederum die Spinwellen. Erste Ansätze zur Beschreibung dieser Kopplung stammen von Hertz und Klenin [22] und Murata und Doniach [23]. Moriya und Kawabata [24] gaben dann eine Behandlung des Problems an, die sich als außergewöhnlich erfolgreich bei den sogenannten schwachen Ferromagneten erwies, während sie für die starken Ferromagneten Fe, Co und Ni ungeeignet ist, bei denen viele experimentelle Hinweise auf einen gewissen lokalen Charakter der magnetischen Freiheitsgrade vorliegen (Entropiebeitrag zur spezifischen Wärme, Curie-Weiß-Gesetz, Magnetisierungskurve, Magnetovolumeneffekte). Das eigentliche Problem, nämlich Anregungen der Art, die typisch für das Bandbild sind (Einteilchenanregungen und longitudinale Spinwellen), und solche, die typisch für ein Heisenbergmodell sind, unter einen Hut zu bekommen, blieben weiter ungelöst. Die ersten Ansätze zur Lösung des Problems basierten auf der Anwendung der Coherent Potential Approximation (CPA) von Soven [25] (siehe auch [26]), einer verbesserten Theorie für die elektronische Struktur von Legierungen, zum Teil unter Zu-

hilfenahme des Funktionalintegrals. In diesen Arbeiten ([27] - [31]) werden elektronische Anregungen und statische Spinkonfigurationen, die auf Zustände des Isingmodells beschränkt sind, selbstkonsistent bestimmt. Das Problem dieser Methode besteht darin, daß die CPA eine adiabatische Approximation ist, d.h. man nimmt an, daß die Dynamik der Elektronen durch eine statische Spinkonfiguration bestimmt ist. Diese Annahme ist für die in den Ising-Konfigurationen zugelassenen Anregungen äußerst unrealistisch: möglich sind nur spin-flips und die sind hochenergetisch (weil sie einem großen Impuls entsprechen), d.h. sehr schnell.

Einen Ausweg aus dieser Sackgasse wiesen Korenman und Prange [32] und Capellmann [33], die die Auffassung vertreten, daß hochenergetische Anregungen (d.h. kurzreichweitige Spinwellen) in die Bandberechnung mit eingehen sollten, während man die langwelligen, langsamen Spinfluktuationen, an denen die Elektronen gestreut werden, als statisch ansehen kann. Allerdings ist es den Autoren nur gelungen zu zeigen, wie die Spinfluktuationen die Bandzustände renormieren. Das Spektrum der Spinfluktuationen bleibt unbestimmt, so daß keine selbstkonsistente Theorie vorliegt. Um diese Lücke zu füllen, müßte man ausgehend von der Bandstruktur das Spektrum der Spinfluktuationen bestimmen. Im Bild von Korenman und Prange, bei denen die lokale Magnetisierungsrichtung langsam veränderlich ist, entspräche das einer Kopplung von magnetischen Momenten, deren Ausdehnung etwa so groß ist wie die Entfernung, über die die lokale Magnetisierungsrichtung näherungsweise konstant ist. Diese Länge scheint zumindest beim Nickel (Eisen scheint eher mit dem Bild atomarer magnetischer Momente vereinbar) so groß zu sein, daß dieses magnetische Moment durch ein (lokales) Band bestimmt ist. Nun sind die Kopplungen magnetischer Momente in Bandsystemen äußerst schwer zu berechnen. Während bei Isolatoren eine Kopplung

über virtuelle Zwischenzustände angenommen werden kann, liegen die Dinge hier komplizierter. Die bisher angestellten Rechnungen stützen sich alle mehr oder weniger auf das Funktionalintegral und damit wieder auf Kopplungen atomarer Momente ([34],[35]). Auch Korenman und Prange greifen in ihren letzten beiden Arbeiten [32] wieder auf das Funktionalintegral zurück.

Demgegenüber wird in dieser Arbeit, basierend auf der Idee einer adiabatischen Entkopplung von langreichweitigen und kurzreichweitigen Freiheitsgraden, unter die sowohl Einteilchenanregungen als auch hochenergetische Spinanregungen subsumiert werden, eine heisenbergartige Kopplung zwischen ausgedehnten Clustern berechnet, die auf reellen Prozessen beruht.

2. Aufbau der Arbeit

Im zweiten Abschnitt der Arbeit wird aus physikalischen Überlegungen ein Modellhamiltonoperator hergeleitet. Nach einer kurzen Darstellung der Theorie adiabatischer Freiheitsgrade wird eine Einteilung der Freiheitsgrade in zwei voneinander adiabatisch entkoppelte Gruppen begründet und gezeigt, worin sich diese Einteilung von anderen, ungünstigeren Entkopplungen unterscheidet. In diesem Zusammenhang wird auch der Unterschied zwischen Eisen und Nickel diskutiert. Dann wird gezeigt, daß bereits aus phänomenologischen Gründen folgt, daß die Kopplung der magnetischen Momente heisenbergartig sein muß, indem die langwellige Äquivalenz von Heisenberg-Modell und Landau-Lifschitz-Gleichung gezeigt wird. Um ein äquivalentes Heisenberg-Modell aufzustellen, das den Vorteil hat, daß man seine thermodynamischen Eigenschaften sehr gut kennt, muß man den in ihm vorkommenden Parameter JS^2 bestimmen. Es wird begründet, daß man das durch Vergleich der Grundzustandsenergien unterschiedlicher statischer magnetischer Konfigurationen erreichen kann. Zur Berechnung dieser Grundzustandsenergien wird ein Clusterhamiltonoperator angegeben.

Der dritte Abschnitt befaßt sich mit den Eigenschaften und Problemen dieses Clusterhamiltonoperators. Dazu wird anhand des Andersonmodells untersucht, welche Information über den Nachbarcluster bei der Clusternäherung vernachlässigt wird. Dabei zeigt sich, daß durch die Zerstörung der Phasenkohärenz virtuelle Prozesse hinausprojiziert werden. Es wird dann erläutert, warum zu erwarten ist, daß reelle Prozesse den Hauptbeitrag zur magnetischen Kopplung liefern. Daß dies so ist, ist, zusammen mit der Bestätigung der local-band-theory für Ni, das Hauptergebnis dieser Arbeit. Weiter wird erörtert, wie man vorgehen muß, um künstliche Phasenkohärenz innerhalb des Clusters zu vermeiden.

Im vierten Abschnitt werden die winkelabhängigen Grundzustandsenergien und die kritische Temperatur berechnet. Zuerst wird angegeben, wie das lokale Band berechnet wird. Davon ausgehend werden die den Randwerten entsprechenden Parameter berechnet und angegeben, wie sich die Parameter bei einer Änderung der magnetischen Konfiguration, d.h. des Winkels, transformieren. Diese Rechnung wird sowohl für Fe als auch für Ni durchgeführt. Dann wird kurz die Umrechnung der statischen Energien in kritische Temperaturen besprochen und die kritische Temperatur für beide Metalle in Abhängigkeit von der linearen Clusterdimension (2-10 nächste Nachbarn linear) angegeben.

Im fünften und letzten Abschnitt werden die Ergebnisse diskutiert. Es wird gezeigt, daß sich Ni wesentlich besser mit der Vorstellung lokaler Bänder und langwelligen Spinwellen als den den Phasenübergang treibenden Freiheitsgraden verstehen läßt als Fe, was mit den experimentellen Hinweisen übereinstimmt. Weiterhin werden die Ausgangspunkte für weitergehende Untersuchungen aufgezeigt.

II. Begründung des Hamiltonoperators

1. Adiabatische Entkopplung von Freiheitsgraden

Eine exakte Lösung der meisten physikalisch interessanten Vielteilchensysteme, darunter alle Arten von Festkörpern, ist wegen der Vielzahl der auftretenden Freiheitsgrade, die alle miteinander gekoppelt sind, nicht möglich. In der Regel ist man aber auch nicht an allen Details interessiert. Es stellt sich also die Frage, ob man die interessierende Teilinformation erhalten kann, ohne das gesamte System bestimmen zu müssen, m.a.W. ob man das System in Klassen von Freiheitsgraden einteilen kann, deren Kopplung in irgendeinem Sinn vereinfacht werden kann. Damit ist gemeint, daß die Dynamik des einen Teilsystems nicht wesentlich von der des anderen bestimmt wird, so daß man die beiden Systeme für sich allein lösen kann. Zwar kann man mit Hilfe der Projektionstechnik von Mori und Zwanzig ([36] - [38]) Freiheitsgrade formal entkoppeln, doch nur auf Kosten einer zeitlich nichtlokalen Gleichung, was auch damit bezeichnet wird, daß das System ein Gedächtnis habe, d.h. seine gegenwärtige zeitliche Entwicklung hängt auch von der Vergangenheit ab. Als Beispiel betrachte man einen gedämpften Oszillator, der mit Ort und Impuls zwei Freiheitsgrade hat, die gekoppelten Gleichungen genügen:

$$\dot{v} + 2\gamma v + \omega_0^2 x = 0, \quad \dot{x} = v$$

Diese beiden Gleichungen sind natürlich äquivalent zur gewöhnlichen Oszillatorgleichung

$$\ddot{x} + 2\gamma \dot{x} + \omega_0^2 x = 0,$$

aber im folgenden sind unter Bewegungsgleichungen für Freiheitsgrade nur Differentialgleichungen erster Ordnung zu verstehen, die

direkt die zeitliche Veränderung der betrachteten Variablen angeben. Eine Bewegungsgleichung für x , die nicht mehr mit der für v gekoppelt ist, erhält man durch Integration der Oszillatorgleichung:

$$\ddot{x} + 2\gamma \dot{x} + \omega_0^2 \int_0^t d\tau x(\tau) = 0 ,$$

worin der letzte Term jetzt einen durch die Trägheit bedingten Gedächtniseffekt beinhaltet. In der Regel wird man sich also durch sukzessive Reduktion der betrachteten Freiheitsgrade immer ausgeprägtere Gedächtniseffekte einhandeln, so daß das Problem ohne weitere physikalische Annahmen nicht wirklich einfacher wird. Es kann gezeigt werden, daß sich die Gleichung für einen beliebigen Freiheitsgrad $A(t)$ immer in folgender Form schreiben läßt [39]:

$$(\partial_t + i\Omega) A(t) + \int_0^t d\tau \Gamma(t-\tau) A(\tau) = f_A(t)$$

wobei $\Gamma(t)$ die Gedächtnisfunktion ist, die beschreibt, wie die Information über den Zustand von A durch die Kopplung an die anderen Freiheitsgrade ins "Bad" wandert und dann mit einer gewissen Verzögerung an A zurückgegeben wird, während $f_A(t)$ die auf A wirkenden "Kräfte" beschreibt, die durch den Teil der internen Dynamik der Observablen A entstehen, der nicht durch die Kopplung an A bedingt ist. Eine Form von Näherung, die in diesem Zusammenhang gemacht werden kann, führt zur Langevin-Gleichung. Dazu muß man annehmen, daß die Freiheitsgrade des Bades eine wesentliche schnellere Dynamik haben als der betrachtete Freiheitsgrad. Dann kann man Gedächtniseffekte vernachlässigen und zwar sowohl bezüglich des betrachteten Freiheitsgrades als auch bezüglich der Korrelationen der durch das Bad ausgeübten Kräfte, die

als stochastisch betrachtet werden. Die Langevingleichung hat also dann die Form:

$$\frac{d}{dt} A(t) + \zeta A(t) = f(t)$$

wobei $f(t)$ eine stochastische Kraft ist, deren Mittelwerte verschwinden (der deterministische Term wurde hier als linear angenommen) und deren zweite Momente beinhalten, daß kein Gedächtnis vorliegt:

$$\langle f(t) f(t') \rangle \sim \delta(t - t')$$

Eine zweite exakte formale Entkopplung stellt die Funktionalintegralmethode in der zweiten Quantisierung dar ([40],[41]), bei der die freie Energie eines Vielteilchensystems dargestellt wird als eine geeignete Mittelung der freien Energien eines nicht-wechselwirkenden Systems in beliebigen orts- und zeitabhängigen Feldern. Anschaulich entsprechen diese Felder den fluktuierenden Feldern, denen ein Teilchen durch seine Umgebung ausgesetzt ist. Auch hier muß man eine physikalisch begründete Annahme über das Fluktuationspektrum machen, um etwas zu berechnen.

Demgegenüber soll hier mehr der Weg betont werden, der auf der direkten Umsetzung der physikalischen Vorstellung adiabatischer Prozesse beruht. Man geht dabei davon aus, daß zwei Freiheitsgrade oder zwei Gruppen von Freiheitsgraden sehr weit auseinanderliegende charakteristische Zeitskalen haben, mit der Folge, daß die Dynamik des schnelleren Prozesses nur als Mittelwert in die Bewegungsgleichung des langsameren eingeht und die Dynamik des langsameren in die Bewegungsgleichung des schnelleren als zeitunab-

hängige "Konstante" behandelt werden kann. Betrachten wir als Beispiel zwei gekoppelte (klassische) Freiheitsgrade:

$$\begin{aligned} \text{(I)} \quad & -i \frac{d}{dt} x = \omega_1 x + \alpha y && \text{langsamer Proze\ss} \\ & && (\omega_1 \ll \omega_2) \\ \text{(II)} \quad & -i \frac{d}{dt} y = \omega_2 y + \beta x && \text{schneller Proze\ss} \end{aligned}$$

Durch die Entkopplung erhlt man:

$$\begin{aligned} \text{(I)} \quad & -i \frac{d}{dt} x = \omega_1 x + \alpha \langle y \rangle \\ \text{(II)} \quad & -i \frac{d}{dt} y = \omega_2 y + \beta \text{ const} \implies y(t, \text{const.}) = y(t, x(t)) \end{aligned}$$

Damit sind die Freiheitsgrade zwar nicht unabhngig voneinander, aber man kann ihre Dynamik getrennt berechnen, mu\ss dabei allerdings die Lsungen fr eine ganze Parameterschar bestimmen. Diese Parameter mssen schlie\sslich, und das ist ein Kennzeichen aller Entkopplungen, in irgendeiner Weise selbstkonsistent bestimmt werden; so erhielte man im Beispiel:

$$\begin{aligned} \text{(I)} \quad x(t) &= -\frac{\alpha}{\omega_1} \langle y \rangle + \left(x(0) + \frac{\alpha}{\omega_1} \langle y \rangle \right) e^{i\omega_1 t} \\ \text{(II)} \quad y(t) &= -\frac{\beta}{\omega_2} \text{const.} + \left(y(0) + \frac{\beta}{\omega_2} \text{const.} \right) e^{i\omega_2 t}, \text{const.} \rightarrow x(t) \text{ aus (I)} \end{aligned}$$

In (II) wre jetzt $\langle y \rangle$ zu bestimmen durch Mittelung ber eine charakteristische Zeitskala $2\pi / \omega_1$, was eine (sogenannte selbst-konsistente) Gleichung fr $\langle y \rangle$ ergbe, die dann wieder in (I) eingesetzt wrde. Eine solche Selbstkonsistenzbedingung ist eine zustzliche, physikalisch motivierte (oder oft damit gleichbedeutend: aus einem Variationsprinzip abgeleitete) Zusatzbedingung, die den durch die Entkopplung bedingten Informationsverlust, der

zur Folge hätte, daß einige Parameter (d.h. Mittelwerte) nicht bestimmt werden könnten, partiell kompensiert. In diesem allgemeinen Verfahren erkennt man einige üblicherweise in der Vielteilchenphysik verwendete Methoden wieder: der Fall der Gleichung (I) ist die Molekularfeldmethode, der Fall der Gleichung (II) ist bekannt durch die Renormierungsgruppe: was man genau genommen bei der Gleichung (II) erhielte, wäre eine zeitgeglättete Funktion $\langle y(t) \rangle$, deren Dynamik einer neuen Bewegungsgleichung angepaßt werden könnte, was sich ad infinitum fortsetzen ließe. Bei diesem Spezialfall gehen allerdings einige weitere physikalische Vorstellungen mit ein. Üblicherweise geht man von der Vorstellung aus, daß Freiheitsgrade, die kürzeren charakteristischen Entfernungen (oder kleineren Wellenlängen) entsprechen, auch die größere Energie haben, d.h. daß einer Trennung der Längenskalen auch eine Trennung der Energieskalen korrespondiert. In diesem Fall kann man aufsteigend vorgehen, indem man die schnellen kurzreichweitigen Freiheitsgrade mittelt und als Mittelwert in die makroskopischen Gleichungen einsetzt - also nach Art der Gleichung (I) vorgeht - deren Gestalt oft schon aus phänomenologischen Überlegungen bekannt ist. Bei kritischen Phänomenen ist dies nicht mehr gültig: hat man zum Beispiel eine Gleichung der Art

$$\partial_t M(\underline{r}, t) = D \nabla^2 M(\underline{r}, t)$$

ergibt sich für die Dispersion $\omega = D \cdot k^2$, so daß die Energie umgekehrt proportional der Wellenlänge zum Quadrat ist. In der Gegend des kritischen Punktes geht $D \rightarrow 0$, so daß die mit unterschiedlichen Längenskalen verbundenen Energieunterschiede immer kleiner werden und die Amplituden immer größer. Das führt dazu,

daß Freiheitsgrade der gleichen Art, aber unterschiedlicher Wellenlänge miteinander koppeln (sogenanntes mode-mode-coupling). Im nichtkritischen Fall koppeln diese Freiheitsgrade gar nicht! So gilt in der einfachsten Spinwellennäherung, der random-phase-approximation (RPA), daß $\omega = Dk^2$ und $D \sim \langle M \rangle$, wobei $\langle M \rangle$ die mittlere Magnetisierung ist. Nun wird $\langle M \rangle$ natürlich durch andere Spinwellen beeinflusst, aber die Amplitude dieser Schwankungen ist wegen der kleinen Anzahl der angeregten Spinwellen verschwindend klein gegenüber $\langle M \rangle$, so daß man sie vernachlässigen kann. Im kritischen Fall kommt es aber auf Grund der kleinen Anregungsenergien zu makroskopischen Besetzungszahlen, so daß die Schwankungen von $\langle M \rangle$ in der Größenordnung von $\langle M \rangle$ selber liegen, wodurch dann der Fall (II) eintritt, daß etwa langwellige Spinwellen für eine Abhängigkeit der Art $\langle M \rangle = M_0 \sin \omega t$ sorgen, die dann in die Bewegungsgleichung für kurzwellige Spinwellen eingeht:

$$M_k = \alpha M_0 \sin \omega t \cdot k^2$$

Renormierungsgruppe und (II) haben auch gemeinsam, daß jeder Gedächtniseffekt vernachlässigt wird. Man erkennt, daß diese Theorie auch aufgefaßt werden kann als eine Molekularfeldtheorie, bei der das Molekularfeld eine Dynamik bekommen hat, was der Landautheorie ähnlich ist, und eine Änderung des Hamiltonoperators bedingt. (Bei der Landautheorie muß angemerkt werden, daß sie nicht durch eine adiabatische Entkopplung entsteht, sondern als eine rein phänomenologische Gleichung zu verstehen ist. Der Fortschritt in der Renormierungstheorie besteht gerade darin, auf dem Wege einer adiabatischen Elimination von Freiheitsgraden zu versuchen, zu einer landauähnlichen Theorie zu gelangen. Das ist analog zu der Renormierung in der Feldtheorie, bei der durch Elimination von

Freiheitsgraden eine effektive Einteilchengleichung hergeleitet wird, aber nicht die der Landautheorie entsprechende Einteilchengleichung, die man durch naive Skalierungstheorie erhielte.) Man sieht auch, daß eine Absenkung der kritischen Temperatur gegenüber dem (in der Regel zu hohen) Molekularfeldwert nur möglich ist durch kohärente Überlagerung von Spinwellen, d.h. einer Mode-Mode-Kopplung (cf. RPA, in der die Mode-Mode-Kopplung durch die Annahme statistischer Phasenbeziehungen aus der Welt geschafft wird).

Im folgenden sollen die quantenmechanischen Analoga der oben erläuterten adiabatischen Entkopplung besprochen werden. Dafür eignen sich die den quantenmechanischen Heisenbergschen Bewegungsgleichungen entsprechenden Bewegungsgleichungen für Greensfunktionen. Die entsprechenden Näherungen sollen besprochen werden anhand der von Hubbard [7] entwickelten verbesserten Entkopplung der Greensfunktionen (bekannt als Hubbard III).

Wenn in der klassischen Physik davon die Rede ist, die Dynamik des Systems, d.h. seine Eigenmoden zu bestimmen, so geht es in der Quantenmechanik darum, die Energieeigenwerte eines Systems zu bestimmen. Es ist möglich, zur Lösung dieser Aufgabe Heisenbergsche Bewegungsgleichungen für Operatoren zu verwenden, wobei ein Operator A gesucht ist, für den gilt: $i\hbar \frac{d}{dt} A = [A, H] = E \cdot A = \hbar \omega A$, wobei E ein Energieeigenwert des Systems ist. Allerdings entspricht die zu einem Energieeigenwert gehörende Frequenz ω nur einer Schwingung $e^{i\omega t}$ der Wellenfunktion, nicht einer tatsächlichen Zeitabhängigkeit einer physikalischen Observablen. Die Bewegungsgleichung für eine physikalische Variable entspricht einer Zeitabhängigkeit dieser Observablen und kann z.B. zur Bestimmung der Dispersion kollektiver Moden benutzt werden. Hier hat man es aber mit stationären Zuständen zu tun, d.h.

A kann keine Observable sein. Als geeignet hingegen erweist sich der Vernichtungsoperator: Sei z.B. $H = \hbar \omega a^+ a$, so ergibt sich:

$$i\hbar \frac{d}{dt} a = [a, H] = \hbar \omega a \implies a(t) = a(0) \cdot e^{i\omega t}$$

Wendet man die den Bewegungsgleichungen analoge Technik der Greensfunktionen nach Zubarev [42] auf den Hubbard-Hamiltonoperator $H = \sum_{ik\sigma} t_{ik} c_{i\sigma}^+ c_{k\sigma} + \frac{U}{2} \sum_i n_{i\sigma} n_{i,-\sigma}$ an, wobei t_{ik} das Matrixelement der Wechselwirkung zwischen den Gitterplätzen i und k bezeichnet ($\epsilon_k = \frac{1}{N} \sum_{i-l} t_{i-l} e^{ik(R_i - R_l)}$ ist das zugehörige Band) und U die intraatomare Wechselwirkung, erhält man:

$$E \langle\langle c_{i\sigma} ; c_{j\sigma}^+ \rangle\rangle = \frac{1}{2\pi} \delta_{ij} + \sum_k t_{ik} \langle\langle c_{k\sigma} ; c_{j\sigma}^+ \rangle\rangle + U \langle\langle n_{i,-\sigma} c_{i\sigma} ; c_{j\sigma}^+ \rangle\rangle$$

Macht man nun die Annahme, daß die σ -Elektronen die Dynamik der $-\sigma$ -Elektronen nicht wahrnehmen, sondern nur auf deren mittleren Beitrag zur Wechselwirkung reagieren, so als ob die Bewegung der $-\sigma$ -Elektronen wesentlich schneller wäre als die der σ -Elektronen, was dem oben genannten Fall (I) entspricht, dann kann man $n_{i,-\sigma}$ als Mittelwert einsetzen (hier wurde die Annahme gemacht, daß $\langle n_{i,-\sigma} \rangle = n_{-\sigma}$ nicht vom Gitterplatz abhängt):

$$E \langle\langle c_{i\sigma} ; c_{j\sigma}^+ \rangle\rangle = \frac{1}{2\pi} \delta_{ij} + \sum_k t_{ik} \langle\langle c_{k\sigma} ; c_{j\sigma}^+ \rangle\rangle + U n_{i,-\sigma} \langle\langle c_{i\sigma} ; c_{j\sigma}^+ \rangle\rangle \implies$$

$$E \langle\langle c_{k\sigma} ; c_{k\sigma}^+ \rangle\rangle = \frac{1}{2\pi} + E_k \langle\langle c_{k\sigma} ; c_{k\sigma}^+ \rangle\rangle \implies E_{k\sigma} = \epsilon_k + U n_{-\sigma}$$

Die $E_{k\sigma}$ sind dann die Eigenzustände des Systems. Diese Näherung, in der die Zweiteilchenwechselwirkung durch eine Streuung an einem statischen äußeren Feld ersetzt wird, ist die Molekularfeld- oder Hartree-Fock-Näherung. Hier ist man jetzt mit dem Problem

konfrontiert, daß der Parameter $n_{-\sigma}$ bestimmt werden muß. Das geschieht, wie oben gesagt, durch eine Selbstkonsistenzbedingung: sie besteht aus dem Gleichungssystem $n_{\uparrow} + n_{\downarrow} = n$, wobei n die Anzahl der Elektronen pro Atom ist, und $n = \frac{1}{N} \sum (1 + \exp \beta(E_{k\sigma} - \mu))^{-1}$, wobei μ , das chemische Potential, durch die Elektronenzahl n bestimmt ist. Der entgegengesetzte Grenzfall entsteht, wenn man einen Schritt weitergeht und eine Bewegungsgleichung für die in der ersten Bewegungsgleichung auftauchende höhere Greensfunktion $U \ll n_{i,-\sigma}^+ c_{i\sigma} ; c_{i\sigma}^+ \gg$ aufstellt:

$$E \ll n_{i,-\sigma}^+ c_{i\sigma} ; c_{j\sigma}^+ \gg = n_{-\sigma}^{\alpha} \left\{ \frac{\delta_{ij}}{2\pi} + \sum_k t_{ik} \ll c_{k\sigma} ; c_{j\sigma}^+ \gg \right\} + \epsilon_{\alpha} \ll n_{i,-\sigma}^{\alpha} c_{i\sigma} ; c_{j\sigma}^+ \gg$$

$$+ \sum_k t_{ik} \ll (n_{i,-\sigma}^{\alpha} - n_{-\sigma}^{\alpha}) c_{k\sigma} ; c_{j\sigma}^+ \gg \quad (\text{Term A, von } [c_{i\sigma}, H])$$

$$+ \xi_{\alpha} \sum t_{ik} \left\{ \ll c_{i,-\sigma}^+ c_{k,-\sigma} c_{i\sigma} ; c_{j\sigma}^+ \gg - \ll c_{k,-\sigma}^+ c_{i,-\sigma} c_{i\sigma} ; c_{j\sigma}^+ \gg \right\}$$

(Term B, von $[n_{i,-\sigma}^{\alpha}, H]$)

Hubbard [7] behandelte zuerst den Term A, die "scattering correction", und vernachlässigte Term B. Die damit verbundene anschauliche Vorstellung ist die eines Systems, in dem die $-\sigma$ -Elektronen gar keine Dynamik haben, also festgefroren sind, so, als ob ihre Bewegung wesentlich langsamer wäre als die der σ -Elektronen, so daß man quasi ein Legierungsproblem hat: die σ -Elektronen bewegen sich in einem Kristall mit zwei Arten von Atomen: Atome, die kein $-\sigma$ -Elektron haben und Atome, die ein $-\sigma$ -Elektron haben. Hubbards Näherung für den Term ist daher identisch mit einer Legierungstheorie, der coherent potential approximation (CPA). Diese Behandlung entspricht dem oben besprochenen Fall (II), wie man auch daran erkennen kann, daß $[n_{i,-\sigma}^{\alpha}, H] =$

$\frac{1}{i\hbar} \frac{dn_{i,-\sigma}}{dt}$ vernachlässigt wird, ohne daß $n_{i,-\sigma}$ zur Konstanten wird. (d.h. sie wird nicht aus der Greensfunktion $\langle\langle n_{i,-\sigma}, c_{i\sigma}; c_{j\sigma}^+ \rangle\rangle$ herausgezogen). Auch hier wird zur Lösung die Selbstkonsistenzbedingung benötigt. Man kann also die beiden Methoden wie folgt zusammenfassen:

Hartree-Fock: 1. mittele die Zweiteilchenwechselwirkung

2. berechne die Dynamik

CPA : 1. berechne die Dynamik für eine statische Konfiguration

2. mittele über die Konfigurationen

In Wirklichkeit läßt sich eine brauchbare Lösung durch keine der beiden physikalischen Methoden erhalten. Hubbards Lösung, die auch die "resonance broadening correction", die durch Berücksichtigung des Terms B entsteht, beinhaltet, zeigt allerdings, daß die Hartree-Fock-Methode wenigstens für große Bandbreiten vernünftig ist, was allerdings auf einer anderen als der obigen Begründung beruht, die ja auch offensichtlich falsch ist, weil i.a. keine der beiden Spinrichtungen der Elektronen ausgezeichnet ist, so daß keine Elektronensorte eine schnellere oder langsamere Dynamik haben sollte als die andere. Daß die Hartree-Fock-Methode dennoch Gültigkeit haben kann, liegt an quantenmechanischen Effekten. Im obigen Beispiel sorgt z.B. die Bewegung der $-\sigma$ -Elektronen dafür, daß die einzelnen Atome zwischen zwei Zuständen hin- und herpendeln, deren resonante Energien für die σ -Elektronen sich um die Energie U unterscheiden. Geschieht das mit einer charakteristischen Zeit $\tau \ll \hbar / U$, dann können sich wegen der Unschärferelation $\Delta t \cdot \Delta E \geq \hbar$ gar keine energetisch scharfen resonanten Zustände einstellen, ganz unabhängig davon, auf welcher Zeitskala die Dynamik der daran gestreuten σ -Elektronen liegt. Dieses Phänomen ist bekannt unter dem Namen

"motional narrowing" ([43],[44]). Das bedeutet konkret, daß die Spektralfunktion $A_0(k,\omega)$ für ein σ -Elektron bei wachsender Bandbreite den motional-narrowing-Effekt zeigt: die Peaks für die beiden resonanten Zustände kommen einander näher, wobei sie breiter werden, verschmelzen zu einem sehr breiten Peak, der dann zunehmend schmaler wird.

Allgemein kann man sagen, Hartree-Fock ist brauchbar (über den adiabatisch begründeten Fall hinaus) bei hoher Fermientartung (d.h. großer Bandbreite) durch Beschränkung der energetisch verfügbaren Streuzustände (wegen des Pauliprinzips) unter der Voraussetzung eines nicht zu kurzreichweitigen Potentials, bei dem die Wechselwirkung Stoßcharakter bekommen würde und die Elektronen nicht die volle Potentialstärke spüren würden, so daß die geometrischen Fluktuationen sich energetisch über die Potentialreichweite wegmitteln; dieses Wechselwirkungspotential darf aber auch nicht zu langreichweitig sein, weil es sonst zu kohärenten Fluktuationen nichtstatistischen Charakters kommt, die zu kollektiven Moden führen (z.B. homogenes Elektronengas mit Coulombwechselwirkung). Es gibt verschiedene Möglichkeiten, die Hartree-Fock-Methode zu verbessern. So kann man ein Teilchen herausgreifen und dessen Wechselwirkung mit dem Rest des Kristalls als eine Wechselwirkung mit einem durch eine i.a. impuls- und frequenzabhängige Responsefunktion beschriebene Medium ansehen. Man kann beginnen mit dem Fall, daß sich das Medium wie freie Teilchen verhält, womit man beim Elektronengas die Hartree-Fock-Lösung erhält; setzt man diese wieder für das Medium ein, erhält man die RPA und so kann man weiter hierarchisch aufsteigen. Man erkennt, daß der Fortschritt über Hartree-Fock darin besteht, daß das Medium und damit das auf ein einzelnes Teilchen wirkende Feld sich zeitlich und räumlich verändern kann, während es bei

Hartree-Fock konstant sein muß (vgl. [45]-[47]). Auf diesen Ansatz führt letztlich die oben zitierte Arbeit von Hertz-Klein [22]; ihre Rechnung, die auf der Funktionalintegralmethode basiert, ist äquivalent zu einer RPA, in der man die freie Suszeptibilität durch eine Suszeptibilität ersetzt, die gemittelt wurde über fluktuierende Felder, denen die freien Teilchen unterliegen. Der Arbeit von Moriya und Kawabata [24] liegen ähnliche Gedanken zugrunde. Ein anderer Versuch, über Hartree-Fock hinauszukommen, sind Clustertheorien: hier berechnet man z.B. im Heisenbergmodell die Dynamik einiger Spins (die den Cluster bilden) exakt, wobei angenommen wird, daß sich der Cluster in einem konstanten Feld seitens der Umgebung befindet, das dann selbstkonsistent bestimmt wird durch Berechnung des vom Cluster erzeugten Feldes. Ähnlich wie die CPA sind Clustertheorien in der Lage, kurzreichweitigen Korrelationen Rechnung zu tragen, erfassen aber nicht die durch langreichweitige Korrelationen bedingten kollektiven Moden. Durch die Vernachlässigung von Freiheitsgraden wird die Entropie unterschätzt, wodurch sich beim Heisenbergmodell sowohl für die RPA (die nur langreichweitige Korrelationen erfaßt) als auch für die Clustertheorien zu hohe kritische Temperaturen ergeben. Tahir-Kheli [48] hat gezeigt, wie man durch Vereinigung beider Methoden die richtige Curie-Temperatur anpassen kann. Diese Vorstellung findet ihre Bestätigung durch eine Arbeit von Zittartz [49], der unter Verwendung der von Bohm und Pines [50] für das Elektronengas entwickelten Methode zeigt, daß man das Heisenbergmodell zerlegen kann in einen Spinwellenanteil und einen Spinhamiltonoperator mit einer Ising-Restwechselwirkung, m.a.W. wenn man die kollektiven Moden abzieht, bleibt ein System mit kurzreichweitischer Korrelation übrig (die Anregungen des Isingmodells sind hochenergetisch, d.h. kurzreichweitig). Das legt die

Vermutung nahe, daß die kritische Temperatur des Isingmodells und die mit einer Clustermethode bestimmte kritische Temperatur eines Heisenbergmodells mit gleicher Austauschkopplung etwa gleich sein sollten. Das ist tatsächlich der Fall.

2. Entkopplung von Freiheitsgraden bei den ferromagnetischen 3d - Metallen

Nachdem, wie im historischen Abriß aufgeführt wurde, klar geworden war, daß die magnetischen Eigenschaften der 3d - Metalle mit einem Bandbild unvereinbar waren, versuchten viele Autoren ([51], [29],[30],[32] - [35]), ein effektives Heisenbergmodell herzuleiten. Das bedeutete, man mußte erklären, wie lokale (d.h. atomare) magnetische Momente zustande kommen und ihre Wechselwirkung bestimmen. Ein Ansatz zur ersten Frage war das Andersonmodell, das ein einzelnes Atom mit d - Orbital in einem Fermisee von s - Elektronen beschreibt, mit dem das d - Orbital hybridisiert. Dabei wird angenommen, daß zwei Elektronen, die sich im d - Orbital befinden, einer gegenseitigen Coulombabstoßung ausgesetzt sind:

$$H = \sum_{k\sigma} \epsilon_k c_{k\sigma}^+ c_{k\sigma} + \sum_{\sigma} \epsilon_d c_{d\sigma}^+ c_{d\sigma} + \frac{U}{2} \sum_{\sigma} n_{d\sigma} n_{d,-\sigma} + \sum_{k\sigma} (V_{kd} c_{k\sigma}^+ c_{d\sigma} + \overline{V_{kd}} c_{d\sigma}^+ c_{k\sigma})$$

Anderson behandelte sein Modell, indem er die Dynamik des d - Orbitals durch eine Hartree-Fock-Approximation unterdrückte, dafür aber eine Lösung für alle Kopplungsstärken zwischen den s - und d - Zuständen erhielt. Seine Lösung (Fig.1) bestätigt, was man bei Berücksichtigung der Fälle, bei denen adiabatische Entkopplung möglich ist, erwarten würde: die s - Elektronen, die für dynamische Prozesse, d.h. Streuung, zur Verfügung stehen, sind die Elektronen an der Fermikante, so daß die charakteristische Energie der s - Elektronenfreiheitsgrade ϵ_F ist, die der d - Elektronen hingegen ϵ_d und $\epsilon_d + U$. Ein d - Orbital allein hätte immer ein lokales Moment, das bei schwacher Kopplung und Trennung der Energieskalen, d.h. $\epsilon_d \ll \epsilon_F \ll \epsilon_d + U$ erhalten bleiben sollte. Tatsächlich sieht man, daß die Bildung des lokalen Momentes gerade dann unterdrückt wird, wenn ϵ_F gegen ϵ_d oder $\epsilon_d + U$ geht.

Weiter würde man erwarten, daß bei starker (d.h. starrer) Kopplung die unpolarisierten s-Elektronen die d-Polarisierung unterdrücken. Auch das ist der Fall und zwar ist charakteristischerweise das lokale Moment gegenüber zunehmender Kopplungsstärke am stabilsten in der Gegend stärkster Energieseparierung. Ähnliches ergibt sich jetzt auch, wenn man versucht, die Wechselwirkungen zwischen zwei lokalen Momenten zu verstehen: Man kann eine heisenbergartige Wechselwirkung ableiten, wenn man die Voraussetzung schwacher Kopplung und Trennung der Energieskalen hat. (z.B. unter Verwendung der Schrieffer-Wolff-Transformation [53]). Bei den d-Metallen sind aber i.a. beide Voraussetzungen nicht erfüllt: die d-Elektronen koppeln untereinander, so daß keine Entkopplung zweier Elektronensysteme besteht (d.h. für entsprechende Ansätze von Edwards und Stearns [54]-[56] fehlt die Grundlage!), während andererseits überhaupt kein theoretischer Grund vorliegt, warum die Energie, die ein lokales Moment stabilisiert, größer sein soll als die Wechselwirkungsenergie zwischen den Atomen (Bandenergie ~ 1 eV, intraatomare Coulombabstoßung ~ 1 eV): Selbst im Bereich des atomaren Limes des Hubbardmodells, wo U groß und damit die Kopplung $J = t^2/U$ klein ist (t ist das Hopping-Integral), zeigten Heise und Jelitto [13], daß man ein Heisenbergmodell mit magnetischen Momenten erhält, die mit zunehmendem t immer ausgedehnter sind, auf jeden Fall also nicht atomar. Demgegenüber wird hier die Ansicht vertreten, daß die einzig sinnvolle adiabatische Entkopplung eine zwischen langwelligen und kurzwelligen Freiheitsgraden ist, unabhängig von der Natur der Freiheitsgrade. Die Hoffnung dabei ist, daß die Länge, die die beiden Bereiche trennt, in einer Größenordnung liegt, die es ermöglicht, daß sich im kurzwelligen Bereich sogenannte lokale Bänder [56] ausbilden können. Ob das so ist,

ist eine Frage der Energie der einzelnen Freiheitsgrade. Es scheint so, als ob die Voraussetzungen bei Ni eher erfüllt seien als bei Fe (Co hat vermutlich einen ganz anderen Mechanismus, der für Ferromagnetismus verantwortlich ist, was man z.B. daran erkennen kann, daß Co mit $T_C = 1388^\circ\text{K}$ und $q_C/q_S = 1.34$ nicht in den Rhodes-Wohlfarth-plot (Fig.2) paßt). Das geht z.B. auch aus Hubbards Arbeiten [30] hervor, der mit einem lokalen Ansatz für Fe wesentlich bessere Ergebnisse erhält als für Ni. Weiterhin läßt sich die Magnetisierungskurve in Abhängigkeit von der Temperatur bei Fe besser an ein Heisenbergmodell anpassen [58] als bei Ni [59]. Aus dem Rhodes-Wohlfarth-plot [60], bei dem das Verhältnis der effektiven magnetischen Momente im Curie-Weiß-Gesetz und der Sättigungsmagnetisierung gegen die Curie-temperatur aufgetragen wird (Fig.2), liegt Fe mit $q_C/q_S = 1.03$ am lokalen Ende der Kurve, Ni mit $q_C/q_S = 1.46$ mehr in der Mitte. Ein weiteres Indiz für diese Vorstellung ist der Nachweis von Spinwellen durch Neutronenstreuung für einen Temperaturbereich bis $1.4 T_C$ bei Eisen und $2.0 T_C$ bei Nickel [61],[62]. Mit anderen Worten: die kurzwelligen Freiheitsgrade enthalten das lokale Band (einschließlich Renormierung durch schnelle Spinfluktuationen) sowie longitudinale Spinwellen, wie sie in der RPA berechnet werden, und die die oberhalb T_C gesehenen Spinwellen darstellen. (Im dreidimensionalen Heisenbergmodell mit Nächstnachbarwechselwirkung existieren nach dem gegenwärtigen Stand der Untersuchungen keine Spinwellen oberhalb T_C .) Die langwelligen Freiheitsgrade sind transversale Spinfluktuationen, die den Phasenübergang treiben. Ausgehend von dieser Vorstellung entwickelten Korenman und Prange [32] ihre Vorstellung einer quasistatischen ortsabhängigen Magnetisierung $M(\underline{r})$, die langsam veränderlich ist, so daß sich lokale Bänder einstellen

können, deren Austauschspaltung sich auf eine Differenz in den Besetzungszahlen für Spins parallel oder antiparallel zur Richtung von $M(\underline{r})$ gründet. In dieser Arbeit wird diese Vorstellung umgesetzt in ein Bild von ausgedehnten lokalen Momenten, deren Stärke der Austauschspaltung entspricht, die also analog der Bandtheorie bestimmt werden. Diese lokalen Momente, so die im nächsten Abschnitt näher begründete Annahme, wechselwirken wie magnetische Momente in einem Heisenbergmodell. Man beachte, daß die hier erwähnten transversalen Spinfluktuationen makroskopische Abweichungen von der vorherrschenden Magnetisierungsrichtung sind, d.h. man hat eine kohärente Überlagerung von normalen Spinwellen oder, anders ausgedrückt, einen Hochamplituden- d.h. klassischen Fall, wodurch eine mode-mode-coupling überhaupt erst möglich wird. Wodurch diese bandartigen lokalen Momente oder Momente der einzelnen Cluster stabilisiert werden - das ist die schon genannte energetische Frage - wird in dieser Arbeit nicht untersucht. Dieser Sachverhalt muß späteren Untersuchungen vorbehalten bleiben, die an die Ideen Heines [63], [64], anknüpfen sollten.

3. Begründung der Heisenbergkopplung

Auch ohne mikroskopische Rechnung lassen sich manchmal etwa aus Symmetriegründen globale Aussagen über die Eigenschaften des Festkörpers machen oder sogenannte phänomenologische Gleichungen ableiten. Ein Beispiel dafür ist die Landau-Lifschitz-Gleichung [65],[66], die, wenn die Spin-Bahn-Kopplung und Anisotropiefelder vernachlässigt werden können, die Dynamik der orts- und zeitabhängigen Magnetisierung beschreibt:

$$\partial_t \underline{M} = \underline{M} \times \left[\underline{H} + D / M \cdot \nabla^2 \underline{M} \right]$$

Diese Gleichung ist offenbar nichtlinear und beschreibt eine Kontinuums-theorie, wie man daraus erkennen kann, daß $\underline{M}(\underline{r}, t)$ eine stetige Orts- und Zeitvariable ist. Im folgenden soll gezeigt werden, daß das Heisenbergmodell und die Landau-Lifschitz-Gleichung im langwelligen Bereich äquivalent sind; im kurzwelligen Bereich ist das natürlich nicht möglich, da man dann in den mikroskopischen Bereich gerät, der durch eine Kontinuums-theorie nicht beschrieben werden kann. Das allgemeine Heisenbergmodell lautet:

$$H = \sum_{i,j} J_{i-j} \underline{S}_i \cdot \underline{S}_j$$

Als quantenmechanische Bewegungsgleichung ergibt sich:

$$\dot{\underline{S}}_i = \frac{1}{i\hbar} [\underline{S}_i, H] = - \sum_j 2 J_{i-j} \underline{S}_i \times \underline{S}_j = 2 \sum_j J_{i-j} \underline{S}_j \times \underline{S}_i = 2 \underline{G}_i \times \underline{S}_i$$

wobei $\underline{G}_i = \sum_j J_{i-j} \underline{S}_j$ die Faltung der Funktionen J_i und $\underline{S}_i$ ist. Durch eine Fouriertransformation erhält man:

$$\dot{\underline{S}}_q = 2 \sum_{\tilde{q}} \underline{G}_{\tilde{q}} \times \underline{S}_{q-\tilde{q}} = 2 \sum_{\tilde{q}} J(\tilde{q}) \underline{S}_{\tilde{q}} \times \underline{S}_{q-\tilde{q}}$$

Hierbei wurde benutzt, daß eine Fouriertransformation eine Faltung in ein Produkt überführt und umgekehrt. Die Faltung zweier Funktionen $f(x)$ und $g(x)$ ist definiert als $f(x) \star g(x) = \int_{-\infty}^{+\infty} dy f(x-y) \cdot g(y)$. Auch für kleine q (d.h. große Wellenlänge) beinhaltet die Gleichung auch eine Kopplung an große $\tilde{q}$. Im Sinne der oben ausgeführten adiabatischen Näherung ist hier $\underline{S}_{\tilde{q}}$ durch $\langle \underline{S}_{\tilde{q}} \rangle = 0$ zu ersetzen; man kann dies in der Gleichung dadurch berücksichtigen, daß man $J(\tilde{q}) = 0$ setzt für größere $\tilde{q}$. Dadurch ist es möglich, $J(\tilde{q})$ in eine Fourierreihe zu entwickeln:

$$J(\tilde{q}) = J(\tilde{q}=0) + \frac{1}{2} \left. \frac{\partial^2 J}{\partial \tilde{q}^2} \right|_{\tilde{q}=0} \cdot q^2 + \dots \approx J(0) + \frac{\alpha}{2} \tilde{q}^2$$

Dann lautet die Gleichung:

$$\dot{\underline{S}}_{\tilde{q}} = 2 J(0) \sum_{\tilde{q}} \underline{S}_{\tilde{q}} \times \underline{S}_{q-\tilde{q}} + \alpha \sum_{\tilde{q}} \tilde{q}^2 \cdot \underline{S}_{\tilde{q}} \times \underline{S}_{q-\tilde{q}}$$

Es ist

$$\sum_{\tilde{q}} \underline{S}_{\tilde{q}} \times \underline{S}_{q-\tilde{q}} = - \sum_{\tilde{q}} \underline{S}_{q-\tilde{q}} \times \underline{S}_{\tilde{q}} = - \sum_{\tilde{q}} \underline{S}_{\tilde{q}} \times \underline{S}_{q-\tilde{q}},$$

d.h.

$$\sum_{\tilde{q}} \underline{S}_{\tilde{q}} \times \underline{S}_{q-\tilde{q}} = 0$$

Das ist eine Folge der Tatsache, daß $\sum_{\tilde{q}} \underline{S}_{\tilde{q}} \times \underline{S}_{q-\tilde{q}}$ die Fouriertransformierte von $\underline{S}_i \times \underline{S}_i = 0$ ist.

Als Endergebnis erhält man also: $\dot{\underline{S}}_{\tilde{q}} = \alpha \sum_{\tilde{q}} \tilde{q}^2 \underline{S}_{\tilde{q}} \times \underline{S}_{q-\tilde{q}}$. Den kleineren q entsprechen kleine Energien $\hbar \omega_q$, so daß die entsprechenden Moden hochangeregt sind und man die Größen $\underline{S}_q$ als klassische Größen betrachten kann oder mit anderen Worten: man kann die quantenmechanischen Fluktuationen der $\underline{S}_q$ um ihren klassischen Wert vernachlässigen. Bildet man die Fouriertransformierte der Landau-Lifschitz-Gleichung, in der der Betrag von $\underline{M}(\underline{r})$ ortsun-

abhängig ist, erhält man (in unserem Fall ist $\underline{H} = 0$):

$$\frac{M}{M_0} = - \frac{D}{M} \sum_{\vec{c}} \vec{c}^2 \frac{M_0}{M_0 - \vec{c}^2}$$

Diese Gleichung ist mit der aus dem Heisenbergmodell abgeleiteten Gleichung identisch, womit gezeigt ist, daß im langwelligen Grenzfall jeder Magnet, der die phänomenologische Landau-Lifschitz-Gleichung erfüllt, durch ein Heisenbergmodell beschrieben werden kann.

4. Bestimmung des Kopplungsparameters aus der magnetischen potentiellen Energie

Nachdem nun klar ist, daß man versuchen muß, ein Heisenbergmodell abzuleiten, soll dies im folgenden für die Ferromagneten Eisen und Nickel geschehen. Da es sich hierbei um Kopplungen zwischen Momenten handelt, die aus Clustern bestehen, beschränken wir uns auf eine Nächstnachbarkopplung. Eine direkte Kopplung zwischen übernächsten Clustern, die bereits viele Gitterplätze voneinander getrennt sind, wäre unphysikalisch. Der (auf Grund der Nächstnachbarkopplung einzige) Kopplungsparameter des Heisenbergmodells kann bestimmt werden, indem man die potentielle Energie verschiedener Spinkonfigurationen auf zwei verschiedenen Wegen berechnet. Mit Spinkonfigurationen sind hier zwei benachbarte (Cluster-) Momente gemeint, deren Magnetisierungsrichtungen den Winkel φ bilden. Diese Anordnung wird statisch behandelt, weil aufgrund der Ausdehnung der Momente (und der damit verbundenen großen Wellenlänge) die entsprechenden magnetischen Anregungen (die φ zeitabhängig machen würden) wesentlich langsamer sind als die Bandanregungen innerhalb der lokalen Momente. Das ist nichts anderes als die in Abschnitt II.1 beschriebene adiabatische Entkopplung. Außerdem wird angenommen, daß das magnetische Moment eines Clusters wegen seiner Ausdehnung so groß ist, daß man die Winkelquantisierung im Spinraum vernachlässigen und klassisch rechnen kann.

Die erste Methode gibt den Zusammenhang zwischen den Parametern des Heisenbergmodells und der potentiellen Energie einer Spinkonfiguration an: Die potentielle Energie zweier Momente $\underline{S}_i$ und $\underline{S}_j$, die den relativen Winkel φ einnehmen, ist (bei ferromagnetischem Austausch):

$$E(\varphi) = -J \underline{S}_i \cdot \underline{S}_j = -J S^2 \cos \varphi$$

Wir sind interessiert an der Energiedifferenz:

$$\begin{aligned}\Delta E(\varphi) &= E(\varphi) - E(0) = -JS^2(\cos^2\varphi - 1) = -JS^2(\cos^2\varphi/2 - \sin^2\varphi/2 - 1) \\ &= 2JS^2 \sin^2\varphi/2\end{aligned}$$

Die zweite Methode bringt $E(\varphi)$ in Zusammenhang mit den lokalen Bändern des Cluster. Wenn man dies, wie in den folgenden Abschnitten ausgeführt, berechnet hat, kann man JS^2 für das Heisenbergmodell bestimmen. Alle diese Rechnungen beziehen sich auf statische Konfigurationen bei der Temperatur $T = 0$. Die grundlegende Annahme dabei ist, daß man die Kopplungsparameter des Heisenbergmodells mit lokalen Bändern bei $T = 0$ berechnen kann, weil die Bandanregungen wesentlich höher liegen als die des Heisenbergmodells, d.h. die Thermodynamik des Systems ist ausschließlich die des Heisenbergmodells, während die Bandanregungen bis zu Temperaturen von der Größenordnung der Curietemperatur und darüber eingefroren sind. Mit anderen Worten: die folgenden Rechnungen beziehen sich auf $T = 0$. Erst am Ende der Arbeit, wenn JS^2 bestimmt ist, wird die Thermodynamik auf das Heisenbergmodell angewendet.

5. Der Clusterhamiltonoperator

Es bleibt jetzt noch die Aufgabe, $\Delta E(\varphi)$ mit einer zweiten Methode zu berechnen. Wir nehmen dazu an, daß ausgedehnte Cluster vorliegen, die durch den Hubbardhamiltonoperator beschrieben werden sollen (wir beschränken uns zunächst auf den Fall eines einzigen Bandes):

$$H = \sum_{i,j,\sigma}^{Cl.} t c_{i\sigma}^+ c_{j\sigma} + \sum_i^{Cl.} U n_{i\uparrow} n_{i\downarrow}$$

Der erste Term beschreibt ein Band in der tight-binding-Näherung, der zweite eine intraatomare Coulomb-Wechselwirkung. Dieser Hamiltonoperator läßt sich allerdings auch schon für relativ kleine Cluster nicht mehr exakt lösen. Es wird daher die Annahme gemacht, daß der Cluster groß genug ist, um lokale Bänder zu definieren, m.a.W. der Hamiltonoperator wird approximiert durch ein aufgrund der Coulomb-Wechselwirkung austauschaufgespaltenes Band:

$$H = \sum_{k\sigma} \epsilon_{k\sigma} n_{k\sigma}$$

Wie diese Bänder zu bestimmen sind, wird zusammen mit der Mehrbandfrage in Abschnitt IV behandelt. In dieser Näherung ist jetzt allerdings die Wechselwirkung zwischen den Clustern bzw. eines Clusters mit seiner Umgebung nicht erfaßt worden. Hier liegt nun ein wesentlicher Unterschied zu den üblichen magnetischen Clustertheorien [67]. So wird etwa im Heisenbergmodell die Wechselwirkung des Clusters mit der Umgebung durch ein effektives Feld beschrieben, in dem man im Hamiltonoperator die Terme $J \underline{S}_i \cdot \underline{S}_j$ mit i =Gitterplatz im Cluster, j =Gitterplatz außerhalb des Clusters durch $J \underline{S}_i \cdot \underline{H}$ mit $\underline{H} = \langle \underline{S}_j \rangle$ ersetzt. Dann berechnet man den Cluster exakt in Abhängigkeit von $\underline{H}$, bestimmt das vom Cluster selbst

erzeugte Feld, das im Sinne einer Selbstkonsistenzbedingung mit H gleich gesetzt wird. Das ist in unserem Fall nicht möglich: die wesentliche Wechselwirkung - die intraatomare Coulombwechselwirkung - wirkt nicht von einem Atom aufs andere und schon gar nicht von einem Cluster auf den anderen. Eine Kopplung kommt erst dadurch zustande, daß die Information über die lokale Spinrichtung durch Elektronenübergänge weiter vermittelt wird. Mit Elektronenübergang wird hier die Tatsache bezeichnet, daß ein Elektron z.B. von einem Randplatz i im Cluster zu einem benachbarten Gitterplatz j außerhalb des Clusters springen kann und umgekehrt. Diese indirekte Informationsvermittlung wird durch einen (in unserem Ausgangshamiltonoperator enthaltenen) Term $t(c_{i\sigma}^+ c_{j\sigma} + c_{i\sigma} c_{j\sigma}^+)$ beschrieben; wir erhalten dann:

$$H = \sum_{k\sigma} \epsilon_{k\sigma} n_k + \sum_{i\sigma}^{bd} t(c_{i\sigma}^+ c_{j\sigma} + c_{j\sigma} c_{i\sigma}^+)$$

wobei die Summe im zweiten Term sich über alle Randplätze des Gitters erstreckt.

Das Problem, das sich jetzt stellt, ist, daß die Wechselwirkung zwischen den Clustern nicht mehr durch ein Feld - eine physikalische Observable - beschrieben wird. Bildet man in Analogie zur üblichen Clustermethode Erwartungswerte für die Größen, die sich auf Gitterplätzen außerhalb des Clusters beziehen, erhält man Erwartungswerte von nichtobservablen Größen: $\gamma_{i\sigma} = t \langle c_{j\sigma} \rangle$, $\bar{\gamma}_{i\sigma} = t \langle c_{j\sigma}^+ \rangle$. Erwartungswerte dieser Art wurden zuerst von Caron und Pratt [68] betrachtet. Berücksichtigt man noch, daß man durch Bilden dieser Erwartungswerte einen Hamiltonoperator bekommt, der die Teilchenzahl nicht erhält, und man demzufolge ein chemisches Potential μ einführen muß, ergibt sich schließlich als endgültiger Clusterhamiltonoperator:

$$H = \sum_{k\sigma} (\varepsilon_{k\sigma} - \mu) n_{k\sigma} + \sum_{i\sigma}^{bd} (c_{i\sigma}^+ \gamma_{i\sigma} + c_{i\sigma} \bar{\gamma}_{i\sigma})$$

Welche Eigenschaften und Probleme bei der eben eingeführten Transportclusternäherung, wie wir sie nennen wollen, auftreten, ist Gegenstand des nächsten Abschnittes.

III. Eigenschaften der Transportclusternäherung

1. Transportclusternäherung am Beispiel des Andersonmodells

Das Andersonmodell wurde entwickelt, um zu untersuchen, unter welchen Bedingungen ein isoliertes Atom eines Übergangsmetalls innerhalb eines anderen paramagnetischen Metalls ein lokales Moment ausbilden kann. Es enthält einen Term, der das d-Orbital der Verunreinigung und die dort herrschende Coulomb-Wechselwirkung beschreibt: $\sum_{\sigma} \epsilon_d n_{d\sigma} + U n_{d\uparrow} n_{d\downarrow}$.

Außerdem enthält es das s-Band des Wirtsmetalls und die Kopplung der s- und d-Elektronen durch Elektronenübergänge:

$$H = \sum_{k\sigma} \epsilon_k n_{k\sigma} + \sum_{k\sigma} (V_{kd} c_{k\sigma}^+ c_{d\sigma} + V_{kd}^* c_{d\sigma}^+ c_{k\sigma}) + \sum_{\sigma} \epsilon_d n_{d\sigma} + U n_{d\uparrow} n_{d\downarrow}$$

Man erkennt, daß man hier einen ähnlichen Fall wie beim obigen Clusterhamiltonoperator vorliegen hat: die Wechselwirkung ist intraatomar und daher auf das d-Orbital beschränkt und man hat eine Kopplung durch Elektronenübergänge zwischen den s- und d-Elektronen, so daß sich das Andersonmodell, dessen Eigenschaften gut bekannt sind, hervorragend als Test für die Transportclusternäherung eignet. Die Clusternäherung bewirkt dann eine Entkopplung:

$$H_s = \sum_{k\sigma} (\epsilon_{k\sigma} - \mu) n_{k\sigma} + \sum_{k\sigma} (V_{kd} c_{k\sigma}^+ \langle c_{d\sigma} \rangle + V_{kd}^* c_{k\sigma} \langle c_{d\sigma}^+ \rangle)$$

$$H_d = \sum_{\sigma} (\epsilon_d - \mu) n_{d\sigma} + U n_{d\uparrow} n_{d\downarrow} + \sum_{k\sigma} (V_{kd} \langle c_{k\sigma}^+ \rangle c_{d\sigma} + V_{kd}^* \langle c_{k\sigma} \rangle c_{d\sigma}^+)$$

$$= \sum_{\sigma} (\epsilon_d - \mu) n_{d\sigma} + U n_{d\uparrow} n_{d\downarrow} + \sum_{\sigma} (\gamma_{s\sigma} c_{d\sigma}^+ + \bar{\gamma}_{s\sigma} c_{d\sigma})$$

$$\text{mit } \bar{\gamma}_{s\sigma} = \sum_k V_{kd} \langle c_{k\sigma}^+ \rangle$$

Dieses Problem ist nun in mehreren Schritten zu lösen:

- H_d wird diagonalisiert, d.h. man erhält Eigenzustände in Abhängigkeit von den Parametern des Hamiltonoperators $E_k(\{c_{k\sigma}\})$
- mit Hilfe der Lösung von a) wird $\langle c_{d\sigma} \rangle$ ebenfalls als Funktion der $\langle c_{k\sigma} \rangle$ berechnet, d.h. $\langle c_{d\sigma} \rangle = f(\{c_{k\sigma}\})$
- H_s wird diagonalisiert (mit Eigenzuständen der Form $E_n(\langle c_{d\sigma} \rangle)$)
- mit Hilfe der Lösung von c) wird $\langle c_{k\sigma}^+ \rangle$ berechnet als Funktion der $\langle c_{d\sigma} \rangle$: $\langle c_{k\sigma}^+ \rangle = g(\langle c_{d\sigma} \rangle)$
- die gekoppelten (Selbstkonsistenz-) Gleichungen $\langle c_{d\sigma} \rangle = f(\{c_{k\sigma}\})$, $\langle c_{k\sigma}^+ \rangle = g(\langle c_{d\sigma} \rangle)$ werden nach den Erwartungswerten aufgelöst
- die Lösungen e) werden in H_d und H_s eingesetzt; damit hat man zwei effektive Hamiltonoperatoren, die nun zwei voneinander getrennte Systeme beschreiben

- Der H_d -Operator läßt sich leicht diagonalisieren 68 : mit den Zuständen $|0\rangle$, $|\downarrow\rangle$, $|\uparrow\rangle$, $|\uparrow\uparrow\rangle = c_{d\uparrow}^+ c_{d\downarrow}^+ |0\rangle$ ergibt sich:

H_d	$ 0\rangle$	$ \downarrow\rangle$	$ \uparrow\rangle$	$ \uparrow\uparrow\rangle$
$ 0\rangle$	0	γ_{s-}	γ_{s+}	0
$ \downarrow\rangle$	$\bar{\gamma}_{s-}$	$\epsilon_d - \mu$	0	γ_{s+}
$ \uparrow\rangle$	$\bar{\gamma}_{s+}$	0	$\epsilon_d - \mu$	$-\gamma_{s-}$
$ \uparrow\uparrow\rangle$	0	γ_{s+}	$-\bar{\gamma}_{s-}$	$2(\epsilon_d - \mu) + U$

mit $\Gamma^2 = |\gamma_+|^2 + |\gamma_-|^2$

und $\Gamma|\alpha\rangle = \gamma_+|\uparrow\rangle + \gamma_-|\downarrow\rangle$

$\Gamma|\beta\rangle = -\bar{\gamma}_-|\uparrow\rangle + \bar{\gamma}_+|\downarrow\rangle$

ergibt sich:

H_d	$ 0\rangle$	$ \alpha\rangle$	$ \beta\rangle$	$ \uparrow\uparrow\rangle$
$ 0\rangle$	0	Γ	0	0
$ \alpha\rangle$	Γ	$\epsilon_d - \mu$	0	0
$ \beta\rangle$	0	0	$\epsilon_d - \mu$	Γ
$ \uparrow\uparrow\rangle$	0	0	Γ	$U + 2(\epsilon_d - \mu)$

Die Matrix zerfällt in zwei Teile, die Eigenwertgleichung also in zwei Polynome:

$$E(E - \epsilon_d + \mu) - \Gamma^2 = 0, \quad (E - \epsilon_d + \mu)(E - U - 2(\epsilon_d - \mu)) - \Gamma^2 = 0$$

mit den Lösungen

$$E_{1,2} = \frac{\epsilon_d - \mu}{2} \pm \frac{1}{2} \sqrt{(\epsilon_d - \mu)^2 + 4\Gamma^2}$$

$$E_{3,4} = \frac{3(\epsilon_d - \mu) + U}{2} \pm \frac{1}{2} \sqrt{(\epsilon_d - \mu + U)^2 + 4\Gamma^2}$$

wobei für $\Gamma \rightarrow 0$ gelten soll:

$$E_1 \rightarrow 0, \quad E_2 \rightarrow \epsilon_d - \mu, \quad E_3 \rightarrow \epsilon_d - \mu, \quad E_4 \rightarrow 2(\epsilon_d - \mu) + U$$

Als Wellenfunktion ergeben sich:

$$|\varphi_{1,2}\rangle = \frac{\Gamma |0\rangle + E_{1,2} |\alpha\rangle}{\sqrt{\Gamma^2 + E_{1,2}^2}}$$

$$|\varphi_{3,4}\rangle = \frac{\Gamma |\beta\rangle + (E_{3,4} - \epsilon_d + \mu) |\uparrow\uparrow\rangle}{\sqrt{\Gamma^2 + (E_{3,4} - \epsilon_d + \mu)^2}}$$

- b) Um $\langle c_{d\sigma} \rangle$ zu bestimmen, muß man angeben, mit welchem Zustand der Erwartungswert zu bilden ist. Da wir uns auf den Fall $T = 0$ beschränkt hatten, ist dieser Zustand der Grundzustand oder der Zustand mit der niedrigsten Energie. Welcher Zustand das ist, hängt in diesem Fall vom chemischen Potential μ ab. In der Regel betrachtet man den Fall $\epsilon_d < \mu < \epsilon_d + U$. Für nicht zu großes Γ kommen für den Grundzustand nur φ_2 oder φ_3 in Frage. In beiden Fällen ergibt sich:

$$\langle \varphi_{2,3} | c_{d\sigma} | \varphi_{2,3} \rangle = \frac{E_{2,3} - \epsilon_d + \mu}{\Gamma^2 + (E_{2,3} - \epsilon_d + \mu)^2} \gamma_\sigma$$

- c) Die Diagonalisierung des H_s -Operators ist wesentlich komplizierter:

$$\begin{aligned} H_s &= \sum_{k\sigma} (\epsilon_k - \mu) n_{k\sigma} + \sum_{k\sigma} (V_{kd} c_{k\sigma}^+ \langle c_{d\sigma} \rangle + V_{kd}^* c_{k\sigma} \langle c_{d\sigma}^+ \rangle) \\ &= \sum_{k\sigma} (\epsilon_k - \mu) n_{k\sigma} + \sum_{k\sigma} (\gamma_{k\sigma} c_{k\sigma}^+ + \bar{\gamma}_{k\sigma} c_{k\sigma}) \end{aligned}$$

$$\text{mit } \gamma_{k\sigma} = V_{kd} \langle c_{d\sigma} \rangle$$

Dieser Hamiltonoperator kann nicht mehr exakt diagonalisiert werden. Da, wie im Abschnitt II.1 ausgeführt wurde, eine Entkopplung zwischen dem d- und s-System nur sinnvoll ist, wenn die Kopplung schwach ist, d.h. die γ_σ klein sind, kann man hier Störungsrechnung verwenden.

Eine Methode, die der Störungsrechnung zweiter Ordnung verwandt ist, ist die Methode der näherungsweise kanonischen Transformation (Anhang I). Sie hat den Vorteil, einen effektiven Hamiltonoperator anzugeben, aus dem der in H_1 lineare

Term eliminiert ist (und höhere als quadratische Terme vernachlässigt sind). Das führt dazu, daß die $c_{k\sigma}^{\pm}$ nicht mehr einzeln auftreten können, oder m.a.W.: die Teilchenzahlerhaltung ist wieder gültig. Wendet man diese Methode, die einer Schrieffer-Wolff-Transformation [53] ähnlich ist, auf H_S an, ergibt sich (die konkrete Rechnung ist in Anhang II angegeben):

$$\begin{aligned} \tilde{H}_S = & \sum_{k\sigma} (\epsilon_k - \mu) n_{k\sigma} + \sum_{\substack{kk' \\ \sigma\sigma'}} \gamma_{k\sigma} \bar{\gamma}_{k'\sigma'} \left[(\epsilon_{k\sigma} - \mu)^{-1} + (\epsilon_{k'\sigma'} - \mu)^{-1} \right] c_{k\sigma}^+ c_{k'\sigma'} \\ & - \sum_{k\sigma} \frac{|\gamma_{k\sigma}|^2}{\epsilon_{k\sigma} - \mu} \end{aligned}$$

Damit haben wir jetzt zwar einen effektiven Einteilchenhamiltonoperator, der aber immer noch nicht exakt gelöst werden kann, da es sich um ein Problem handelt, daß dem eines Teilchens in einem beliebigen Potential äquivalent ist. Man wendet also nochmals (wieder unter der Annahme kleiner γ_{σ}) Störungsrechnung auf $\tilde{H}_S$ an:

$$\begin{aligned} E = & \sum_{k\sigma} (\epsilon_{k\sigma} - \mu) \langle 0 | c_{k\sigma}^+ c_{k\sigma} | 0 \rangle + \sum_{k\sigma} \frac{|\gamma_{k\sigma}|^2}{\epsilon_k - \mu} (2 \langle 0 | c_{k\sigma}^+ c_{k\sigma} | 0 \rangle - 1) \\ = & \sum_{k\sigma} \tilde{\epsilon}_{k\sigma} n_{k\sigma} - E_0 \end{aligned}$$

$$\text{mit} \quad \tilde{\epsilon}_{k\sigma} = \epsilon_k + \frac{2 |\gamma_{k\sigma}|^2}{\epsilon_k - \mu}$$

wobei $\langle 0 |$ den Grundzustand von $H_0 = \sum_{k\sigma} (\epsilon_{k\sigma} - \mu) c_{k\sigma}^+ c_{k\sigma}$ bezeichnet und verwendet wurde, daß in erster Ordnung Störungsrechnung die Matrixelemente von H_1 , die in der durch die Eigenzustände von H_0 definierten Basis nichtdiagonal sind (das

sind gerade die Elemente, für die $k \neq k'$ und $\sigma \neq \sigma'$ ist), nicht beitragen.

- d) Es ist jetzt allerdings nicht mehr ganz einfach $\langle c_{k\sigma}^+ \rangle$ zu bestimmen. Würde man naiverweise diesen Erwartungswert mit dem effektiven Hamiltonoperator $\tilde{H}^{(1)} = \sum_{k\sigma} \tilde{\epsilon}_{k\sigma} n_{k\sigma} - E_0$ bilden, erhielte man $\langle c_{k\sigma}^+ \rangle = 0$. Das liegt daran, daß $\langle c_{k\sigma}^+ \rangle$ mit dem ursprünglichen Hamiltonoperator gebildet wurde und nicht mit dem jetzt vorliegenden. Man muß also $\langle c_{k\sigma}^+ \rangle$ durch eine Rücktransformation auf Erwartungswerte, die mit $\tilde{H}^{(1)}$ gebildet werden, beziehen. Das geschieht in Anhang III und führt zu folgendem Ergebnis:

$$\langle c_{k\sigma}^+ \rangle = \frac{\bar{V}_{k\sigma}}{\epsilon_{k\sigma} - \mu} (2\bar{n}_{k\sigma} - 1) = \frac{\bar{V}_{kd}}{\epsilon_{k\sigma} - \mu} (2\bar{n}_{k\sigma} - 1) \langle c_{d\sigma}^+ \rangle$$

- e) Man hat, um die $\langle c_{k\sigma}^+ \rangle, \langle c_{d\sigma}^+ \rangle$ zu bestimmen, zwei gekoppelte Gleichungen zu lösen:

$$(I) \quad \langle c_{d\sigma}^+ \rangle = \frac{E_m - \epsilon_d + \mu}{\Gamma^2 + (E_m - \epsilon_d + \mu)^2} \sum_k V_{kd} \langle c_{k\sigma}^+ \rangle = G(\Gamma^2) \sum_k V_{kd} \langle c_{k\sigma}^+ \rangle$$

$$(II) \quad \langle c_{k\sigma}^+ \rangle = \frac{\bar{V}_{kd} (2\bar{n}_{k\sigma} - 1)}{\epsilon_{k\sigma} - \mu} \langle c_{d\sigma}^+ \rangle \Rightarrow \text{(Einsetzen von (II) in (I))}$$

$$\langle c_{d\sigma}^+ \rangle = G(\Gamma^2) \sum_k V_{kd} \frac{\bar{V}_{kd} (2\bar{n}_{k\sigma} - 1)}{\epsilon_{k\sigma} - \mu} \langle c_{d\sigma}^+ \rangle = G(\Gamma^2) A \langle c_{d\sigma}^+ \rangle$$

$$G(\Gamma^2) A = 1 \quad \text{mit} \quad A = \sum_k |V_{kd}|^2 \frac{2\bar{n}_{k\sigma} - 1}{\epsilon_{k\sigma} - \mu}$$

Dies führt zu einer Bedingung für Γ , wie am Beispiel $E_m = E_d$ gezeigt werden soll:

$$G(\Gamma^2) A = 1 \Rightarrow \Gamma^2 + (E_2 - \epsilon_d + \mu)^2 = A(E_2 - \epsilon_d + \mu)$$

wegen $E_2(E_2 - \epsilon_d + \mu) = \Gamma^2$ ergibt sich:

$$\Gamma^2 + (E_2 - \epsilon_d + \mu)^2 = \frac{A}{E_2} \Gamma^2 \Rightarrow \Gamma^2(E_2 - A) + (E_2 - \epsilon_d + \mu)^2 E_2 = 0 \Rightarrow$$

$$\Gamma^2(E_2 - A + E_2 - \epsilon_d - \mu) = 0 \Rightarrow 2E_2 - (\epsilon_d - \mu) = -\sqrt{(\epsilon_d - \mu)^2 + 4\Gamma^2} = A$$

(an der trivialen Lösung $\Gamma = 0$ sind wir nicht interessiert)

$$\Rightarrow 4\Gamma^2 = A^2 - (\epsilon_d - \mu)^2 \Rightarrow \Gamma = \frac{1}{2} \sqrt{A^2 - (\epsilon_d - \mu)^2}$$

Die so gefundene Lösung können wir überprüfen, indem wir feststellen, ob sie auch die durch Einsetzen von (I) in (II) erhaltene Gleichung befriedigt:

$$\langle c_{k\sigma}^+ \rangle = \frac{\bar{V}_{kd} (2\bar{n}_{k\sigma} - 1)}{\epsilon_{k\sigma} - \mu} G(\Gamma^2) \sum_{k'} V_{k'd} \langle c_{k'\sigma}^+ \rangle$$

$$\sum_k V_{kd} \langle c_{k\sigma}^+ \rangle = \sum_k \underbrace{\frac{|V_{kd}|^2 (2\bar{n}_{k\sigma} - 1)}{\epsilon_{k\sigma} - \mu}}_A G(\Gamma^2) \sum_{k'} V_{k'd} \langle c_{k'\sigma}^+ \rangle = \sum_{k'} V_{k'd} \langle c_{k'\sigma}^+ \rangle$$

was korrekt ist.

Man sieht hier, daß es nicht möglich ist, die Erwartungswerte genauer zu bestimmen, als durch die Kenntnis von Γ bzw. $|\gamma_{k\sigma}|^2 = \Gamma^2/2$ gegeben ist; insbesondere bleiben die Phasen von $\langle c_{k\sigma}^+ \rangle$ und $\langle c_{d\sigma}^+ \rangle$ unbestimmt!

- f) Die Hamiltonoperatoren H_d und H_s können daher nicht konkret angegeben werden, d.h. wir können die Wellenfunktionen nicht bestimmen. Wohl angeben können wir jedoch (zumindest innerhalb der hier gemachten Näherungen) die Energieeigen-

werte, die nur von Γ^2 abhängen:

So ist $\Gamma = \frac{1}{2} \sqrt{A^2 - (\epsilon_d - \mu)^2}$ in die Lösungen $E_1, \dots, E_4$ von H_d einzusetzen, bzw. $\Gamma^2 = \frac{1}{4} [A^2 - (\epsilon_d - \mu)^2] = 2 |\gamma_{k\sigma}|^2$ in die $\tilde{\epsilon}_{k\sigma}$ von H_s .

Wie sind diese Ergebnisse zu interpretieren?

Γ ist auf Grund seiner Definition eine reelle Größe, d.h. man erhält nur Lösungen $\langle c_{d\sigma} \rangle$, $\langle c_{k\sigma} \rangle \neq 0$, wenn $A^2 > (\epsilon_d - \mu)^2$ ist, d.h. erst ab einer kritischen Kopplungsstärke $|V_{kd}|^2$. Um diesen Sachverhalt zu verstehen, muß man sich den Unterschied zwischen virtuellen und realen Übergängen oder Transportprozessen klar-machen. Unter virtuellen Übergängen sollen hier verstanden werden Übergänge von einem System ins andere (d.h. hier vom d-System ins s-System und umgekehrt), die nicht energieerhaltend sind und demnach nur für kurze Zeit erlaubt sind. In einer zeit-unabhängigen Lösung, wie sie die Energieeigenwerte repräsentieren, können sie nur indirekt auftauchen: als Effekt eines virtuellen Übergangs und des entsprechenden kompensierenden Übergangs, der den ursprünglichen Zustand wiederherstellt. Ein realer Übergang oder Transportprozess ist demgegenüber ein Übergang zwischen zwei Niveaus der beiden Systeme, die die gleiche Energie haben. Diese Übergänge sind daher wegen der verschwindenden Energienenner oder Resonanzen nicht störungstheoretisch berechenbar. Benutzt man etwa im Andersonhamiltonian $H = H_d + H_s + H_{sd}$ (mit H_{sd} als Störung) antisymmetrisierte Produktzustände der Eigenzustände von H_d und H_s als Basis, trägt die erste Ordnung Störungstheorie (entsprechend einmaligen Übergängen) nicht bei, während man in zweiter Ordnung Beiträge erhält, wobei der Energienenner gerade die Energiedifferenz der s- und d-Niveaus ergibt, also ein Maß für die Verletzung der Energieerhaltung

ist. Setzt man die zweite Ordnung Störungsrechnung per Schrieffer-Wolff-Transformation in einen effektiven Hamiltonoperator um, erhält man: $H_{\text{eff}} = \tilde{H}_d + \tilde{H}_s$, d.h. einen Hamiltonoperator, der die beiden Systeme nicht koppelt, obwohl die Effekte der Kopplung durch virtuelle Übergänge erfaßt sind. Entsprechend ist der Erwartungswert $\langle c_d^+ c_k \rangle = 0$, was in der Transportclusternäherung dem Fall $\langle c_d^+ \rangle = \langle c_k \rangle = 0$ entspräche. Hat man reale Übergänge, muß man wegen der Entartung $H_0 = H_d + H_s$ vordiagonalisieren, d.h. die Eigenzustände von H_0 werden dann Überlagerungen von Zuständen sein, die verschiedene Anzahlen von Elektronen im d-System (oder, damit gleichbedeutend, im s-System) haben. Damit kann dann auch der Störungsterm erster Ordnung, der ja die Besetzungszahlen in den Teilsystemen nicht erhält, beitragen. Außerdem sind (im entsprechenden effektiven Hamiltonoperator) die Erwartungswerte $\langle c_d^+ c_k \rangle$ bzw. in der Transportclusternäherung $\langle c_d^+ \rangle$ und $\langle c_k \rangle$ von Null verschieden!

Mit der Entkopplung der Transportclusternäherung, in der der Störungsterm den Erwartungswerten proportional ist, sind also Kopplungen durch virtuelle Übergänge nicht mehr enthalten. Das erklärt, warum wir Lösungen erst ab einer kritischen Schwelle der Kopplung erhalten: Die Erwartungswerte sind ein Maß für Leitfähigkeit oder realen Elektronentransport, der erst einsetzt, wenn er energetisch möglich ist, d.h. wenn durch die Wechselwirkung des d-Niveau so verbreitert ist, daß die Zustandsdichte über die Fermikante hinausragt. Andererseits ergibt die Lösung hier, daß bis zum Einsetzen der Leitfähigkeit das d-Niveau überhaupt nicht von der Wechselwirkung beeinflusst wird, was unsinnig ist, weil eine Wechselwirkung über die hier nicht erfaßten virtuellen Übergänge stattfindet.

Eine genauere Vorstellung von den hier vorliegenden Verhältnissen erhält man durch Vergleich mit der exakten $U=0$ -Lösung bzw. der Schrieffer-Wolff-Lösung für $U \neq 0$ ([69], §7.8).

Die hier angegebene Lösung lautet:

$$E = \epsilon_d - \mu + \Gamma^2 / (\epsilon_d - \mu)$$

$$= \epsilon_d - \mu + \frac{1}{\epsilon_d - \mu} \left[\sum_k |V_{kd}|^2 \frac{2\bar{n}_{k\sigma} - 1}{\epsilon_d - \mu} \right]^2 - (\epsilon_d - \mu)^2$$

die exakte Lösung für $U = 0$ (die Dämpfung wurde vernachlässigt):

$$E - \epsilon_d - P \sum_k \frac{|V_{kd}|^2}{E - \epsilon_k} = 0 \quad \text{oder näherungsweise:} \quad E = P \sum_k \frac{|V_{kd}|^2}{\epsilon_d - \epsilon_k} + \epsilon_d$$

die Schrieffer-Wolff-Lösung (gültig für kleine $|V_{kd}|^2$):

$$H_d = \sum_{\sigma} \left[\epsilon_{d\sigma} + \sum_{k\bar{\sigma}} |V_{kd}|^2 \left(\frac{n_{d,-\bar{\sigma}} - 1}{\epsilon_k - \epsilon_-} - \frac{n_{d,-\bar{\sigma}}}{\epsilon_k - \epsilon_+} \right) \right] n_{ds} \quad \text{mit} \quad \begin{aligned} \epsilon_- &= \epsilon_d \\ \epsilon_+ &= \epsilon_d + U \end{aligned}$$

Man sieht, daß für $U = 0$ die beiden letztgenannten Lösungen identisch sind. Man erkennt, daß beide Terme in den Energienennern Energiedifferenzen $\epsilon_k - \epsilon_{\pm}$ enthalten, die auf virtuelle Übergänge zurückgehen. Demgegenüber taucht in der Transportclusternäherung nur die Differenz $\epsilon_d - \mu$ auf, m.a.W. die einzige Information über die Energieniveaus des s -Bandes, die auf das d -Orbital übertragen wird, ist die Lage der Fermienergie. Alle genaueren Informationen über das s -Spektrum sind verlorengegangen. Das ist auch nicht weiter verwunderlich. Ähnlich wie in Abschnitt II.1 kann man zeigen, daß im ungestörten System $H_0 = H_d + H_s$ die Bewegungsgleichung $i\hbar \frac{d}{dt} (c_{k\sigma}^+ c_{k\sigma}) = (\epsilon_k - \epsilon_d) c_{k\sigma}^+ c_{d\sigma}$ gilt, d.h.

$$c_{k\sigma}^+ c_{d\sigma}(t) = c_{k\sigma}^+ c_{d\sigma}(0) e^{-\frac{i}{\hbar}(\epsilon_k - \epsilon_d)t}$$

Die Energiedifferenz ist also eine Folge einer kohärenten Phasenbeziehung zwischen den beiden betrachteten Freiheitsgraden. Diese Phasenbeziehung geht aber durch die obige Kopplung verloren, damit $\langle c_{k\sigma}^+ c_{d\sigma} \rangle \approx \langle c_{k\sigma}^+ \rangle \langle c_{d\sigma} \rangle$ die Phasen von $\langle c_{k\sigma}^+ \rangle$ und $\langle c_{d\sigma} \rangle$ statistisch unabhängig werden. Dies kommt auch darin zum Ausdruck, daß man, wie oben gezeigt, nur $|\langle c_{\pm}^{\pm} \rangle|$ bestimmen kann und die komplexe Phase unbestimmt bleibt.

Zusammenfassend kann man sagen: Die Transportclusternäherung vernachlässigt gewisse auf quantenmechanische Effekte zurückgehende Wechselwirkungen zwischen den Clustern (die auf virtuelle Prozesse oder kohärenten Phasenbeziehungen zwischen c_i^+ und c_j beruhen!). Aus diesem Grunde bleiben die Phasen der Erwartungswerte $\langle c_{\sigma}^{\pm} \rangle$ unbestimmt. Die zwischen den Clustern ausgetauschte Information über die Energieniveaus beschränkt sich auf die Lage der Fermienergie bzw., damit gleichbedeutend, auf die Wirkung von Transportprozessen, denn für die realen Übergänge sind nur entscheidend die ohne energetische Anregung erreichbaren Energieniveaus und das sind die an der Fermikante. Aus diesem Grund ist die Transportclusternäherung für das Andersonmodell wenig geeignet: sie wäre brauchbar, wenn $\epsilon_F \approx \epsilon_d$ oder $\epsilon_d + U$ wäre. Das sind aber genau die Grenzfälle, in denen das d-Orbital kein lokales Moment bildet, so daß auch keine magnetische Kopplung auftreten kann. Unter den für das Andersonmodell physikalisch interessanten Bedingungen hat man eine Kopplung durch virtuelle Prozesse.

2. Bedeutung von Transportprozessen für die Clusterkopplung

Um die Rolle von Transportprozessen abschätzen zu können, sollte man sich die Natur der möglichen magnetischen Kopplungen noch einmal vor Auge halten. Die mikroskopischen Kopplungen haben Austauschnatur, d.h. sie sind quantenmechanischen Charakters. Sie bewirken indirekt eine Rückstellkraft gegenüber Inhomogenitäten der Magnetisierungsdichte. Zu eben dieser Rückstellkraft oder makroskopischen Kopplung tragen aber auch Ausgleichsprozesse bei, d.h. Ausgleich der Inhomogenitäten der Spindichte durch Elektronentransport. Es ist natürlich keine Frage, daß die Magnetisierung der Cluster durch Austauschprozesse stabilisiert wird, was ein wesentlicher Unterschied zum Andersonmodell ist, denn die Cluster haben dadurch ein magnetisches Moment unabhängig von der Art der Kopplung zwischen den Clustern (außerdem haben zwei benachbarte Cluster die gleichen Energieniveaus und Fermienergien). Weniger klar ist, ob diese Austauschprozesse auch wesentlich sind für die Kopplung zwischen den Clustern. Ein Hinweis, daß Transportprozesse die entscheidende Rolle spielen könnten, ergibt sich aus der Entwicklung nach der Bandbreite als Parameter vom atomaren Limes des Hubbardmodells aus: Esterling [70] hat gezeigt, daß der Term 1. Ordnung (der nur im neutralen Fall verschwindet, so daß der zweite rein auf virtuellen Prozessen beruhende antiferromagnetische Term dominiert) dem sogenannten excluded-volume-Problem äquivalent ist, welches ein rein kinetisches Problem ist, in dem Sinne, daß es sich um einen Einteilchenoperator handelt. Das deckt sich mit den von Kapustin [71] und Heise-Jelitto [13] angegebenen effektiven Hamiltonoperatoren, bei denen der Term 1. Ordnung die Gestalt hat:

$$\hat{H}_1 = \sum_{i,j,\sigma} T_{ij} c_{i\sigma}^+ c_{j\sigma} \left\{ n_{i,-\sigma} n_{j,-\sigma} + (1 - n_{i,-\sigma}) (1 - n_{j,-\sigma}) \right\}$$

Man beachte, daß dieser Term den Wechselwirkungsparameter U nicht enthält, sondern daß es sich um einen rein kinetischen Term handelt, der sich nur durch gewisse Restriktionen von einem reinen Bandterm unterscheidet. Es ist zu vermuten, daß dieser Term verantwortlich ist dafür, daß man im Grenzfall $U \rightarrow \infty$ selbst für die kleinste Abweichung von der Neutralität Ferromagnetismus erhält, wie Nagaoka [72] gezeigt hat. Dies deckt sich mit den im vorhergehenden Abschnitt getroffenen Feststellungen hinsichtlich erster und zweiter Ordnung Störungstheorie. Den angekoppelten Systemen H_d und H_s in $H_0 = H_d + H_s$ entsprechen hier im atomaren Limes die einzelnen Atome. Der antiferromagnetische Term zweiter Ordnung beschreibt virtuelle Übergänge zwischen den Atomen, der Term erster Ordnung reale (energieerhaltende) Übergänge, die nur möglich sind, wenn die Elektronenzahl pro Atom $n \neq 1$ ist. All dies legt die Vermutung nahe, daß reale oder Transportprozesse für die Kopplung zwischen den Clustern verantwortlich sind.

Es ist das Hauptergebnis dieser Arbeit, daß die Vorstellung einer ferromagnetischen Kopplung durch Transportprozesse beim Nickel durch eine energetische Abschätzung bestätigt wird.

Das wäre auch der erste Ansatz zur Behandlung des trotz aller Versuche bisher ungelösten und unverstandenen Störungsterms 1. Ordnung in einer Entwicklung um den atomaren Limes des Hubbardmodells. Angemerkt sei noch, daß bei einer Annahme von Transportprozessen statt eines virtuellen Austauschs der Nachteil der Clusternäherung, daß die Richtung der Spins sich abrupt von einem Gitterplatz zum nächsten ändert, anstatt - was realistischer wäre - stetig, wesentlich weniger ins Gewicht fällt.

3. Das Problem künstlicher Phasenkohärenz

Nachdem nun die Transportclusternäherung näher untersucht wurde, wenden wir uns wieder der Aufgabe zu, $\Delta E(\varphi)$ mit Hilfe des in Abschnitt II.5 hergeleiteten Hamiltonoperators zu bestimmen. Bei dem Versuch, diesen zu diagonalisieren, treten jedoch Probleme auf. Wie im vorhergehenden Abschnitt gezeigt wurde, ist die informationsvermittelnde natürliche Phasenkohärenz zwischen den Clustern bei der Transportclusternäherung verlorengegangen. Dafür wurde aber eine künstliche Phasenkohärenz erzeugt: In dem Hamiltonoperator

$$H = \sum_{k\sigma} (\epsilon_{k\sigma} - \mu) n_{k\sigma} + \sum_{i\sigma}^{\text{bd.}} (\gamma_{i\sigma} c_{i\sigma}^+ + \bar{\gamma}_{i\sigma} c_{i\sigma})$$

wurden durch das Ersetzen der Operatoren $c_j^\pm$ durch Erwartungswerte die Vertauschungsrelationen geändert und damit in dem Term $\sum_{i\sigma}^{\text{bd.}} \gamma_{i\sigma} c_{i\sigma}^+ + \text{H.C.}$ eine kohärente Überlagerung von Gitterplätzen erzeugt, die z.B. einen k -Vektor auszeichnen (wenn etwa $\gamma_{i\sigma}$ die Phasen $\gamma_{i\sigma} = \gamma_\sigma e^{ikR_i}$ hätte). Diese Interferenzeffekte sind künstlich (sie bedeuten, daß Elektronen von verschiedenen Gitterplätzen in kohärenter Weise springen, so daß das Hoppen nur durch einen einzigen Freiheitsgrad beschrieben wird (siehe Anhang IV) statt durch so viele unabhängige Prozesse wie Randplätze vorhanden sind) und müssen durch eine Mittelung beseitigt werden. Zu diesem Zweck geht man zur k -Darstellung über: mit

$$c_{i\sigma}^+ = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_k e^{ikR_i} c_{k\sigma}^+ \quad (N = h^3 = \text{Größe des Clusters}) \text{ erhält man}$$

$$\begin{aligned} H &= \sum_{k\sigma} (\epsilon_{k\sigma} - \mu) n_{k\sigma} + \sum_{i\sigma}^{\text{bd.}} \frac{1}{\sqrt{N}} \left(\gamma_{i\sigma} \sum_k e^{ikR_i} c_{k\sigma}^+ + \bar{\gamma}_{i\sigma} \sum_k e^{-ikR_i} c_{k\sigma} \right) \\ &= \sum_{k\sigma} (\epsilon_{k\sigma} - \mu) n_{k\sigma} + \gamma_{k\sigma} c_{k\sigma}^+ + \bar{\gamma}_{k\sigma} c_{k\sigma} \end{aligned}$$

$$\text{mit } \gamma_{k\sigma} = \sum_i^{\text{bd.}} \gamma_{i\sigma} e^{ikR_i} \frac{1}{\sqrt{N}} = \frac{\gamma_\sigma}{\sqrt{N}} \sum_i^{\text{bd.}} e^{i(\varphi_i + kR_i)} = \frac{\gamma_\sigma}{\sqrt{N}} \sum_i^{\text{bd.}} e^{i\psi_i}$$

Hier wurde von der Darstellung einer komplexen Zahl nach nach Absolutbetrag und Phase Gebrauch gemacht: $\gamma_{i\sigma} = \gamma_\sigma e^{i\varphi_i}$. Da $|\gamma_{i\sigma}| = \gamma_\sigma$ ein Maß für das hopping ist, kann es nicht vom speziellen Gitterplatz abhängen. Mittelt man jetzt über alle Phasen, erhält man unter Verwendung von $\langle e^{i\psi_i} \rangle = \frac{1}{2\pi} \int_0^{2\pi} e^{i\varphi} d\varphi = 0$:

$$|\gamma_{k\sigma}|^2 = \left\langle \frac{|\gamma_\sigma|^2}{N} \sum_{i,j}^{\text{bd.}} e^{i(\psi_i - \psi_j)} \right\rangle = \frac{\gamma_\sigma^2}{N} \sum_i^{\text{bd.}} 1 = \frac{\gamma_\sigma^2 h^2}{N} = \frac{\gamma_\sigma^2 h^2}{h^3} = \frac{\gamma_\sigma^2}{h}$$

$$\Rightarrow |\gamma_{k\sigma}| = \frac{\gamma_\sigma}{\sqrt{h}}$$

Die hier betrachtete Grenze zwischen zwei benachbarten Clustern, die wir würfelförmig angenommen haben, besteht natürlich nur aus einer Würfelfläche mit h^2 Gitterplätzen, was in obiger Form verwandt wurde. Damit haben wir folgenden Hamiltonoperator erhalten:

$$H = \sum_{k\sigma} (\epsilon_{k\sigma} - \mu) n_{k\sigma} + \frac{\gamma_\sigma}{\sqrt{h}} (c_{k\sigma}^+ + c_{k\sigma}) = \sum_k H_k$$

$$\text{mit } H_k = (\epsilon_{k\sigma} - \mu) n_{k\sigma} + \frac{\gamma_\sigma}{h} (c_{k\sigma}^+ + c_{k\sigma})$$

Auch dieser Hamiltonoperator enthält noch künstliche Kohärenz durch die Operatoren $c_k^\pm$: durch die Kombination $\sum_k c_{k\sigma}^\pm = c_{i=0,\sigma}^\pm$ ist der Gitterplatz $i=0$ willkürlich ausgezeichnet. Dies kann man verhindern, indem man den Operator behandelt, als ob $[H_k, H_{k'}] = 0$ gälte, wie auch einige Autoren vorgeschlagen haben [73], [74]. Das ist für diesen Hamiltonoperator zwar falsch, für den Ausgangsoperator aber richtig. Daß die Vertauschung aufgehoben wird, ist eine Schwäche der Approximation, die hier wieder rückgängig gemacht

wird. Damit läßt sich dann jedes H_k für sich diagonalisieren, was den Vorteil hat, daß man keinen Gebrauch von der hier unzulässigen Störungstheorie machen muß.

Wir diagonalisieren nun H_k :

Die Matrix lautet:

H_k	$ 0 >$	$ 1 >$
$ 0 >$	0	$\gamma_\sigma / \sqrt{h}$
$ 1 >$	$\gamma_\sigma / \sqrt{h}$	$\epsilon_{k\sigma} - \mu$

Daraus ergibt sich für die Eigenwerte:

$$E(E - \epsilon_k - \mu) - \gamma_\sigma^2 / h = 0 \quad \text{bzw.} \quad E_{1,2} = \frac{\epsilon_{k\sigma} - \mu}{2} \pm \frac{1}{2} \sqrt{(\epsilon_{k\sigma} - \mu)^2 + \gamma_\sigma^2 / h}$$

Wir erhalten hier zwei Lösungen, eine mit der Eigenschaft

$E \xrightarrow{\gamma \rightarrow 0} \epsilon_{k\sigma} - \mu$, das entspricht einem besetzten Zustand, und $E \xrightarrow{\gamma \rightarrow 0} 0$, was einem unbesetzten Zustand entspricht. Wir wollen uns im Energiespektrum auf den Zustandsraum beschränken, der im Fall $\gamma \rightarrow 0$ gerade der Situation entspricht, daß alle Zustände bis zur Fermikante μ besetzt und darüber unbesetzt sind.

Für $\epsilon_{k\sigma} < \mu$ ist die Lösung zu wählen, für die gilt: $E \xrightarrow{\gamma \rightarrow 0} \epsilon_{k\sigma} - \mu$:

$$E_{k\sigma} = \frac{\epsilon_{k\sigma} - \mu}{2} - \frac{1}{2} \sqrt{(\epsilon_{k\sigma} - \mu)^2 + \gamma_\sigma^2 / h} \quad \text{weil} \quad \epsilon_{k\sigma} - \mu < 0 \quad \text{und} \quad \sqrt{\dots} > 0$$

Für $\epsilon_{k\sigma} > \mu$ ist die Lösung zu wählen, für die gilt $E \xrightarrow{\gamma \rightarrow 0} 0$

$$E_{k\sigma} = \frac{\epsilon_{k\sigma} - \mu}{2} + \frac{1}{2} \sqrt{(\epsilon_{k\sigma} - \mu)^2 + \gamma_\sigma^2 / h} \quad \text{weil} \quad \epsilon_{k\sigma} - \mu > 0 \quad \text{und} \quad \sqrt{\dots} > 0$$

Es ergibt sich also unabhängig von μ die Lösung:

$$E_{k\sigma} = \frac{\varepsilon_{k\sigma} - \mu}{2} - \frac{1}{2} \sqrt{(\varepsilon_{k\sigma} - \mu)^2 + \gamma_{\sigma}^2 / \hbar}$$

Der Hamiltonoperator hat also die Form:

$$H = \sum_{k\sigma} E_{k\sigma} n_{k\sigma} \quad \text{mit} \quad E_{k\sigma} = \frac{\varepsilon_{k\sigma} - \mu}{2} - \frac{1}{2} \sqrt{(\varepsilon_{k\sigma} - \mu)^2 + \gamma_{\sigma}^2 / \hbar}$$

IV. Berechnung von $\Delta E(\varphi)$ und kT_c

Die von uns berechneten $E_{k\sigma}(\gamma)$ hängen von den Transportparametern γ_σ ab. Diese Transportparameter hängen ihrerseits wieder ab vom relativen Winkel der Magnetisierungsrichtungen der beiden aneinander gekoppelten Cluster: $\gamma_\sigma = \gamma_\sigma(\varphi)$

Um also $\Delta E(\varphi) = E(\varphi) - E(0)$ zu bestimmen, muß man jetzt noch

$$E(\varphi) = \sum_{k\sigma} E_{k\sigma}(\varphi) = \sum_{k\sigma} \frac{\epsilon_{k\sigma} - \mu}{2} - \frac{1}{2} \sqrt{(\epsilon_{k\sigma} - \mu)^2 + \gamma_\sigma(\varphi)^2 / \hbar}$$

bestimmen bzw.

$$\Delta E(\varphi) = \frac{1}{2} \sum_{k\sigma} \left(\sqrt{(\epsilon_{k\sigma} - \mu)^2 + \gamma_\sigma(0)^2 / \hbar} - \sqrt{(\epsilon_{k\sigma} - \mu)^2 + \gamma_\sigma(\varphi)^2 / \hbar} \right)$$

Zu lösen sind noch folgende Aufgaben:

- Bestimmung des lokalen Bandes $\epsilon_{k\sigma}$
- Bestimmung des chemischen Potentials μ
- Bestimmung des Transportparameters $\gamma_\sigma(0)$ für den homogenen Fall
- Transformation des Transportparameters $\gamma_\sigma(0) \rightarrow \gamma_\sigma(\varphi)$

1. Berechnung des lokalen Bandes

Zur Bestimmung des lokalen Bandes wurde die tight-binding-Näherung benutzt und zwar für die fcc-Kristallstruktur (Ni) bzw. bcc-Struktur (Fe) (siehe z.B. [75]), d.h. man hat die Bandstruktur (a bezeichnet den Abstand zum nächsten Nachbarn):

$$E_\sigma(k) = E_\sigma - 4t \left[\cos k_x a/2 \cdot \cos k_y a/2 + \cos k_x a/2 \cdot \cos k_z a/2 + \cos k_y a/2 \cdot \cos k_z a/2 \right] \quad \text{für fcc-Gitter}$$

$$E_\sigma(k) = E_\sigma - 8t \cdot \cos k_x a/2 \cdot \cos k_y a/2 \cdot \cos k_z a/2 \quad \text{für bcc-Gitter}$$

Die k -Vektoren wurden bestimmt unter der Annahme periodischer Randbedingungen (das ist für die Cluster nötig, weil man sonst, im Gegensatz zum Andersonmodell, Probleme mit überzähligen Freiheitsgraden bekommt und entspricht außerdem der bereits in Abschnitt II.5 vorgenommenen Diagonalisierung von $\sum_{\langle i,j \rangle} t c_i^+ c_j$ zu $\sum_{k\sigma} \epsilon_k n_{k\sigma}$ innerhalb des Clusters, der also einen Quasikristall bildet). Dadurch werden die möglichen k -Werte eingeschränkt:

$$k_i = \frac{2\pi}{ha} p \quad \text{mit } p = 1, \dots, h.$$

Die Parameter t und E_σ wurden den Experimenten entnommen: Sowohl im fcc- wie im bcc-Gitter ist $16t$ die Bandbreite und wegen der willkürlichen Wahl des Energienullpunktes sind mit $D = E_\downarrow - E_\uparrow$, der Austauschspaltung, alle Parameter gegeben. Es wurden verwendet als Bandbreite:

$$W = 3.4 \text{ eV (Ni)} \quad \text{und} \quad W = 6 \text{ eV (Fe)},$$

als Austauschspaltung:

$$D = 0.31 \text{ eV (Ni)} \quad \text{und} \quad D = 1.5 \text{ eV (Fe)}.$$

Alle diese Werte wurden dem Sammelband von Wohlfarth [76] und anderen Arbeiten ([77] - [81]) entnommen. Den dort abgebildeten Bandberechnungen ist auch zu entnehmen, daß die tight-binding-Näherung brauchbare Näherungen für die Zustandsdichten von Fe und Ni liefert (siehe Fig.3). Beim Vergleich der Abbildungen ist zu beachten, daß die berechneten Zustandsdichten eine Überlagerung der Zustandsdichten für beide Spins darstellt.

2. Berechnung von μ und $|\gamma'_\sigma|^2$

Das chemische Potential beschreibt den Einfluß der Umgebung des Clusters. Deshalb wurden die exakten Volumenwerte des chemischen Potentials berechnet. Dies geschah durch Integration der tight-binding-Zustandsdichte in der von Jelitto [82] angegebenen Näherung unter der Annahme von Besetzungszahlen pro Teilband von $n = 1.8$ für Ni und $n = 1.4$ für Fe. Es ergaben sich:

$$\mu = 0.942 \text{ eV für Ni} \quad \text{und} \quad \mu = 1.812 \text{ eV für Fe},$$

wobei die Unterkante des tieferliegenden Spinteilbandes als Nullpunkt genommen wurde. Im folgenden ist nun der Transportparameter γ_σ zu bestimmen. Obwohl eine selbstkonsistente Näherung in der Form, wie sie beim Andersonmodell vorgeführt wurde, sich anbietet, hatten wir doch schon gesehen, daß sie mathematisch nur schwer mit einigen Näherungen zu behandeln ist. Hier wird deshalb eine physikalisch etwas durchsichtigere Methode benutzt: da der Elektronentransport überall der gleiche sein muß, muß gelten, daß die Erwartungswerte von $c_{i\sigma}^+ c_{j\sigma}$ innerhalb eines Clusters und von $\langle c_{i\sigma}^+ \rangle \langle c_{j\sigma} \rangle$ am Rand des Clusters gleich sein müssen, m.a.W.

$$\langle c_{i\sigma}^+ c_{j\sigma} + c_{j\sigma}^+ c_{i\sigma} \rangle = \langle c_{i\sigma}^+ \rangle \langle c_{j\sigma} \rangle + \langle c_{j\sigma}^+ \rangle \langle c_{i\sigma} \rangle = \frac{2|\gamma_\sigma|^2}{t^2} \quad (\text{wegen } \gamma_{i\sigma} = t \langle c_{i\sigma} \rangle)$$

damit ergibt sich:

$$\begin{aligned} 2 \frac{|\gamma_\sigma|^2}{t^2} &= \langle c_{i\sigma}^+ c_{j\sigma} + c_{j\sigma}^+ c_{i\sigma} \rangle = \frac{1}{N} \sum_{\underline{k}, \underline{k}'} e^{i\underline{k}\underline{R}_i - i\underline{k}'\underline{R}_j} \langle c_{\underline{k}\sigma}^+ c_{\underline{k}'\sigma} \rangle + \text{H.C.} \\ &= \frac{1}{N} \sum_{\underline{k}} e^{i\underline{k}\underline{a}} n_{\underline{k}\sigma} + \text{H.C.} = \frac{2}{N} \sum_{\underline{k}} \cos \underline{k}\underline{a} \cdot n_{\underline{k}\sigma} \end{aligned}$$

Man erkennt, daß tatsächlich für ein gefülltes oder leeres Band (alle $n_{\underline{k}\sigma}$ entweder 1 oder 0) $\gamma_\sigma = 0$ ist, wie es physikalisch

sein muß. Dieser Wert wurde mit den genannten, diskreten $\underline{k}$ -Werten berechnet, ebenso wie die tight-binding-Werte und das oben berechnete chemische Potential für die Besetzungszahl $n_{\underline{k}\sigma}$ verwendet wurden. Da man an den Volumenwerten interessiert ist, wird der Grenzwert für $h \rightarrow \infty$ gesucht, was praktisch mit $h = 20$ ausgewertet wurde. Die Ergebnisse lauten:

Ni	$\gamma_{\uparrow} = 0.0$	$\gamma_{\downarrow} = 0.122$
Fe	$\gamma_{\uparrow} = 0.187$	$\gamma_{\downarrow} = 0.397$

3. Berechnung der $\gamma_{\sigma}(\varphi)$

Die im vorhergehenden Abschnitt berechneten γ_{σ} sind die Transportgrößen für einen magnetisch homogenen Cluster. Im hier untersuchten Fall haben wir es jedoch mit zwei benachbarten Clustern zu tun, deren Magnetisierungsrichtungen um den Winkel φ gegeneinander gedreht sind. Für die Zustände im Cluster wurde die z-Achse als Magnetisierungsrichtung gewählt, auf die sich also der Index $\sigma = \pm 1$ bezieht. Die Erwartungswerte γ_{σ} beziehen sich aber schon auf Operatoren des Nachbarclusters und die im Abschnitt 2. berechneten γ_{σ} sind bezogen auf die lokale Magnetisierungsrichtung dieses Clusters, so daß die obigen Werte erst noch einer Transformation im Spinraum unterzogen werden müssen. Die Transporteigenschaften der $c^{\pm}$ können aus denen der Wellenfunktion abgeleitet werden:

$$|\tilde{\psi}_{\sigma}\rangle = c_{\sigma}^{+} |0\rangle = d_{\sigma}^{\sigma'} |\psi_{\sigma'}\rangle = d_{\sigma}^{\sigma'} c_{\sigma'}^{+} |0\rangle \Rightarrow \tilde{c}_{\sigma}^{+} = d_{\sigma}^{\sigma'} c_{\sigma'}^{+}$$

$$|0\rangle = \tilde{c}_{\sigma} |\psi_{\sigma}\rangle = \tilde{c}_{\sigma} d_{\sigma}^{\sigma'} |\psi_{\sigma'}\rangle = c_{\sigma'} |\psi_{\sigma'}\rangle \Rightarrow \tilde{c}_{\sigma} d_{\sigma}^{\sigma'} = c_{\sigma'}, \quad \tilde{c}_{\sigma} = (d^{-1})_{\sigma}^{\sigma'} c_{\sigma'}$$

Hierbei bezeichnet die Matrix d eine beliebige Transformation im Spinraum.

Unter Einsetzen der Spintransformationsmatrix für Drehungen (siehe [83]) ergibt sich:

$$\underline{\tilde{c}}^{+} = (\cos \varphi/2 \cdot \underline{E} - i \sin \varphi/2 \cdot \underline{\rho} \cdot \underline{\sigma}) \underline{c}^{+}, \quad \underline{\tilde{c}} = (\cos \varphi/2 \cdot \underline{E} + i \sin \varphi/2 \cdot \underline{\rho} \cdot \underline{\sigma}) \underline{c},$$

wobei $\underline{\rho}$ die Rotationsachse ist und φ der Drehwinkel.

Hier wurde oBdA die y-Achse als Rotationsachse gewählt:

$$\tilde{c}_{\uparrow}^{\pm} = \cos \varphi/2 \cdot c_{\uparrow}^{\pm} - \sin \varphi/2 \cdot c_{\downarrow}^{\pm}, \quad \tilde{c}_{\downarrow}^{\pm} = \sin \varphi/2 \cdot c_{\uparrow}^{\pm} + \cos \varphi/2 \cdot c_{\downarrow}^{\pm}$$

Damit läßt sich jetzt die Transformation der Erwartungswerte $\langle \tilde{c}_{i\sigma}^+ \tilde{c}_{j\sigma} \rangle$ bestimmen, wobei zu berücksichtigen ist, daß die Bandoperatoren, die zur Bestimmung der γ_σ benutzt wurden, keine spin-flip-Terme enthalten (die sollen bereits in der lokalen Bandstruktur berücksichtigt sein und es sollen ja gerade die Clusterverdrillungen die einzigen magnetischen Freiheitsgrade sein), d.h. alle Erwartungswerte der Form $\langle c_\sigma^+ c_{-\sigma} \rangle$ verschwinden.

$$\langle \tilde{c}_{i\uparrow}^+ \tilde{c}_{j\downarrow} \rangle = \cos^2 \varphi / 2 \langle c_{i\uparrow}^+ c_{j\uparrow} \rangle + \sin^2 \varphi / 2 \langle c_{i\downarrow}^+ c_{j\downarrow} \rangle$$

$$\Rightarrow |\gamma_\uparrow(\varphi)|^2 = \cos^2 \varphi / 2 \cdot |\gamma_\uparrow|^2 + \sin^2 \varphi / 2 \cdot |\gamma_\downarrow|^2$$

$$\langle \tilde{c}_{i\downarrow}^+ \tilde{c}_{j\uparrow} \rangle = \sin^2 \varphi / 2 \langle c_{i\uparrow}^+ c_{j\uparrow} \rangle + \cos^2 \varphi / 2 \langle c_{i\downarrow}^+ c_{j\downarrow} \rangle$$

$$\Rightarrow |\gamma_\downarrow(\varphi)|^2 = \sin^2 \varphi / 2 \cdot |\gamma_\uparrow|^2 + \cos^2 \varphi / 2 \cdot |\gamma_\downarrow|^2$$

4. Berechnung der kritischen Temperaturen

Es sind jetzt alle Parameter bestimmt worden, die in die Grundgleichung

$$2 \Delta E(\varphi) = \sum_{k\sigma} \left(\sqrt{(\epsilon_{k\sigma} - \mu)^2 + \gamma_{\sigma}^2 / h} - \sqrt{(\epsilon_{k\sigma} - \mu)^2 + \gamma_{\sigma}(\varphi)^2 / h} \right)$$

eingehen. Weiter war in Abschnitt II.4 gezeigt worden, daß der Parameter JS^2 mit $\Delta E(\varphi)$ gekoppelt ist: $E(\varphi) = 2JS^2 \sin^2 \varphi / 2$. Die Werte $\Delta E(\varphi)$ wurden numerisch für Fe und Ni bestimmt; es zeigte sich, daß sie in guter Näherung an eine $\sin^2 \varphi / 2$ -Kurve anpaßbar sind, wie in Fig.4 für die Fälle $h=3$ und $h=4$ für Ni gezeigt wird. Es wurde dann JS^2 als der Mittelwert der Werte $\Delta E(\varphi) / 2 \sin^2 \varphi / 2$ bestimmt, wobei φ von 1° - 180° in Abständen von 1° ausgewertet wurde. Die Werte für lineare Clusterabmessungen $h=2$ bis $h=10$ Gitterabstände sind in der nachstehenden Tabelle wiedergegeben:

$h = 2$	Ni	0.0005 eV	Fe	0.1856 eV
3		0.0160		0.3427
4		0.0182		0.5960
5		0.0469		1.0709
6		0.1377		1.4442
7		0.0740		2.4492
8		0.0835		2.9224
9		0.1205		4.3060
10		0.1526		4.9333

Es stellt sich nun die Aufgabe, aus diesen Werten die entsprechenden kritischen Temperaturen zu bestimmen. An dieser Stelle müssen wir auf die d-Bänder von Fe und Ni noch einmal näher eingehen. Wir sind bisher vom Modell eines einzigen Bandes ausgegangen, was

für die d - Bänder natürlich nicht richtig ist, denn die d - Orbitale im Atom sind fünffach entartet oder haben einen zumindest nur noch kleinen energetischen Abstand. In den d - Metallen, in denen diese Bänder dann überlappen würden, kommt noch die durch die kubische Symmetrie bedingte Kristallfeldaufspaltung hinzu, die die Bänder in zwei Gruppen teilt ([84],[85]): die zwei Bänder der Symmetrie $(x^2 - y^2)$, $(3z^2 - r^2)$ bilden die zweidimensionale E_g - Darstellung, die drei Bänder der Symmetrie (xy, yz, zx) bilden die dreidimensionale T_{2g} - Darstellung. Bei Ni gehören die Löcher des Minoritätsbandes der T_{2g} - Darstellung an; diese Löcher liegen in drei getrennten Taschen in der Brillouinzone, die aus Symmetriegründen nicht miteinander wechselwirken, also als drei unabhängige Bänder betrachtet werden können ([80],[86]). Erst durch Überlagerung dieser drei Bänder erhält man mit obiger Näherung die korrekte Zustandsdichte an der Fermifläche. Beim Fe sind die Verhältnisse nicht so eindeutig: hier tragen alle fünf d - Bänder zum Magnetismus bei ([80],[86]), wobei die im folgenden gemachte Annahme, daß die Bänder unabhängig sind, eventuell weniger gut begründet ist. Bei der Annahme unabhängiger Teilbänder kann man jedes einzelne Teilband gesondert behandeln.

Da die Freiheitsgrade eines Bandes mit denen der anderen Teilbänder nicht gekoppelt sind, nimmt jedes Teilbandsystem die gleiche thermische Energie auf. Demzufolge kann die kritische Temperatur aus dem oben für ein einzelnes Teilband berechneten Parameter bestimmt werden. Die exakte kritische Temperatur eines Heisenbergmodells ist für gegebenes zJS^2 (z ist die Anzahl der nächsten Nachbarn) gut bekannt ([87] - [90]). Für den hier vorliegenden Fall verwenden wir den Grenzwert $S \rightarrow \infty$ und $z = 6$ entsprechend den 6 Flächen des würfelförmigen Clusters. Es ergibt sich ein Wert, je nach Autor, von $kT_c/JS^2 = 2.9 - 3.0$, womit sich für die kri-

tischen Temperaturen folgende Tabelle ergibt:

h = 2	Ni	0.0015 eV	Fe	0.5569 eV
3		0.0481		1.0280
4		0.0547		1.7880
5		0.1406		3.2128
6		0.4130		4.3325
7		0.2222		7.3476
8		0.2504		8.7673
9		0.3615		12.9180
10		0.4577		14.7998

Zum Vergleich seien hier die experimentellen Curietemperaturen angegeben: ($1 \text{ eV} \cong 11\,606^{\circ} \text{ K}$)

$$\text{Ni: } T_{\text{C}} = 631^{\circ} \text{ K} \Rightarrow kT_{\text{C}} = 0.054 \text{ eV}$$

$$\text{Fe: } T_{\text{C}} = 1043^{\circ} \text{ K} \Rightarrow kT_{\text{C}} = 0.090 \text{ eV}$$

V. D i s k u s s i o n d e r E r g e b n i s s e

Die in der oben angeführten Tabelle aufgelisteten Werte geben die Übergangstemperatur an, die sich ergeben würde, wenn die Cluster der Ausdehnung h sich magnetisch starr verhielten. Diese Energie nimmt natürlich mit wachsendem h zu. Wenn die gemessene Temperatur kT_c kleiner ist als das berechnete $kT_c(h)$, dann bedeutet das, daß es kurzwelligere Anregungen gibt, als in der Theorie zugelassen sind, d.h. der Cluster ist nicht starr. Der Vergleich mit der Tabelle zeigt, daß Ni mit der Annahme eines starren Clusters einer Abmessung $h = 3 - 4$ nächste Nachbarn in Übereinstimmung gebracht werden kann, was sich mit der lokalen Bandtheorie [32] deckt. In dieser Theorie wird, ausgehend von Neutronenstreudaten eine Länge von $h = 5$ vorgeschlagen, was etwas größer ist als das hier berechnete h . Das ist wohl bedingt durch die Annahme starrer Cluster, während in der lokalen Bandtheorie eine langsam, aber stetig veränderliche Magnetisierung betrachtet wird. Für Fe hingegen zeigt die Tabelle, daß sich keine korrekte Curietemperatur ergibt, was die bereits eingangs erwähnte Vermutung bestätigt und die Anwendbarkeit der lokalen Bandtheorie auf Fe zweifelhaft erscheinen läßt. Es liegt natürlich auf der Hand, daß die gemachten Annahmen, d.h. eines starren Clusters mit scharfer Grenze bzw. im anderen Fall eines Heisenbergmodells mit lokalen Momenten, zu vereinfachend sind, um den wirklichen physikalischen Verhältnissen voll gerecht zu werden. Im allgemeinen Fall wird man zu Korrelationsfunktionen der Magnetisierungsdichte $\langle \underline{M}(\underline{r}) \underline{M}(\underline{r}') \rangle$ geführt, die langreichweitiger sind, als sie es im lokalen Heisenbergmodell wären, aber auch stärker variabel als es in einer Clustertheorie oder auch einer

lokalen Bandtheorie der Fall ist. Ein theoretischer Ansatz hierfür steht noch aus und wäre Gegenstand weiterer Untersuchungen. Einige Gedanken in dieser Richtung sind zwar in Moriyas [91] Arbeit enthalten, er kann aber diese Ansätze nicht umsetzen, weil er auf das Problem einer Bandberechnung mit beliebig inhomogenem Feld stößt, das er mit der CPA nur äußert unzureichend auswertet. Von dieser größeren Problemstellung einmal abgesehen, blieben für spätere Arbeiten noch einige Punkte zu untersuchen:

1. Abschätzung des Beitrags virtueller Prozesse
2. Berechnung des lokalen Bandes (das in dieser Arbeit an die Experimente angepaßt wurde):

Diese Berechnung müßte die ferromagnetische Stabilität und die Starrheit des Clusters erklären. Eine Möglichkeit wäre, von Hubbard III auszugehen. Hubbards Methode, Greensfunktionen mit Operatoren, die sich auf das gleiche Atom beziehen, genauer zu behandeln als solche, die sich auf verschiedene Atome beziehen, erfaßt sicher zuverlässig alle lokalen Effekte, d.h. gibt eine sehr genaue Form der Zustandsdichte.

Wie jedoch L. Roth [92] gezeigt, hat, ist eine solche Entkoppelung, die Greensfunktionen gleicher Ordnung unterschiedlich behandelt, nicht in der Lage, Summenregeln zu erfüllen, die man als globale Eigenschaften, die dem System zukommen, verstehen kann. Andererseits liefern summenregelkonforme Entkoppelungen schlechtere Zustandsdichten. So liegt es nahe, beide Methoden zu kombinieren, indem man Hubbards Bandform übernimmt, aber die Lage der Bandschwerpunkte durch die Summenregeln festlegt.

3. Es sollte möglich sein, die hochaufgelösten Photoemissionsmessungen an Ni [93], die bisher nur qualitativ verstanden

werden konnten [94], in dem Clustermodell quantitativ zu berechnen, indem man die Streuung der Bandelekttronen an den durch ein Heisenberg-Fluktuationsspektrum beschriebenen magnetischen Anregungen bestimmt.

A n h a n g :

I. Es wird zuerst das Verfahren der kanonischen Transformation erläutert: Man geht von einem Hamiltonoperator aus, der in einen ungestörten Anteil und eine schwache Störung zerlegt werden kann: $H = H_0 + H_1$. Wendet man auf diesen Operator eine kanonische Transformation mit einer Erzeugenden S an, erhält man:

$$\tilde{H} = e^{-iS} H e^{iS} = H_0 + H_1 + i[H_0, S] + \frac{1}{2} \left(2i[H_1, S] - [[H_0, S], S] \right) + \dots$$

Wegen der Annahme, daß H_1 schwach ist, vernachlässigt man die mit ... bezeichneten höheren Terme. Bestimmt man S so, daß $i[H_0, S] + H_1 = 0$ ergibt sich: $\tilde{H} = H_0 + \frac{1}{2}[H_1, S]$. Durch diese Wahl von S wurde der Term H_1 in $\tilde{H}$ eliminiert, sodaß $\tilde{H}$ keinen Term mehr enthält, der einem Störungsterm erster Ordnung entspricht, m.a.W. H ist ein Hamiltonoperator, bei dem ein Teil der Diagonalisierung in der Basis der Eigenzustände von H_0 bereits (bis zur zweiten Ordnung) geleistet ist.

II. Das unter I. angegebene Verfahren wird nun auf H_s angewendet:

$$H_s = \underbrace{\sum_{k\sigma} (\epsilon_k - \mu) n_{k\sigma}}_{H_0} + \underbrace{\sum_{k\sigma} (\gamma_{k\sigma} c_{k\sigma}^+ + \bar{\gamma}_{k\sigma} c_{k\sigma})}_{H_1}$$

Macht man den Ansatz $S = \sum_{k\sigma} (\alpha_{k\sigma} c_{k\sigma}^+ + \bar{\alpha}_{k\sigma} c_{k\sigma})$ und setzt man in die Gleichung $i[H_0, S] + H_1 = 0$ ein, ergibt sich als Lösung:

$$\alpha_{k\sigma} = i \frac{\gamma_{k\sigma}}{\epsilon_k - \mu}$$

Setzt man das so gewonnene S in $\tilde{H} = H_0 + \frac{1}{2}[H_1, S]$ ein, erhält man:

$$\tilde{H}_S = \sum_{k\sigma} (\epsilon_k - \mu) c_{k\sigma}^+ c_{k\sigma} + \sum_{\substack{kk' \\ \sigma\sigma'}} \gamma_{k\sigma} \bar{\gamma}_{k'\sigma'} \left[(\epsilon_k - \mu)^{-1} + (\epsilon_{k'} - \mu)^{-1} \right] c_{k\sigma}^+ c_{k'\sigma'} - \sum_{k\sigma} \frac{|\gamma_{k\sigma}|^2}{\epsilon_k - \mu}$$

III. Um Erwartungswerte von Operatoren im ursprünglichen und im transformierten System ineinander umrechnen zu können, ist es zweckmäßig, die entsprechenden Operatoren voneinander zu unterscheiden: so bezeichnen wir den Elektronenerzeuger oder -vernichter in $\tilde{H}_S$ mit $\tilde{c}_{k\sigma}^\pm$ im Gegensatz zu $c_{k\sigma}^\pm$ im ursprünglichen System. Die Operatoren stehen dann in der folgenden Beziehung zueinander:

$$c^\pm = e^{iS} \tilde{c}^\pm e^{-iS}$$

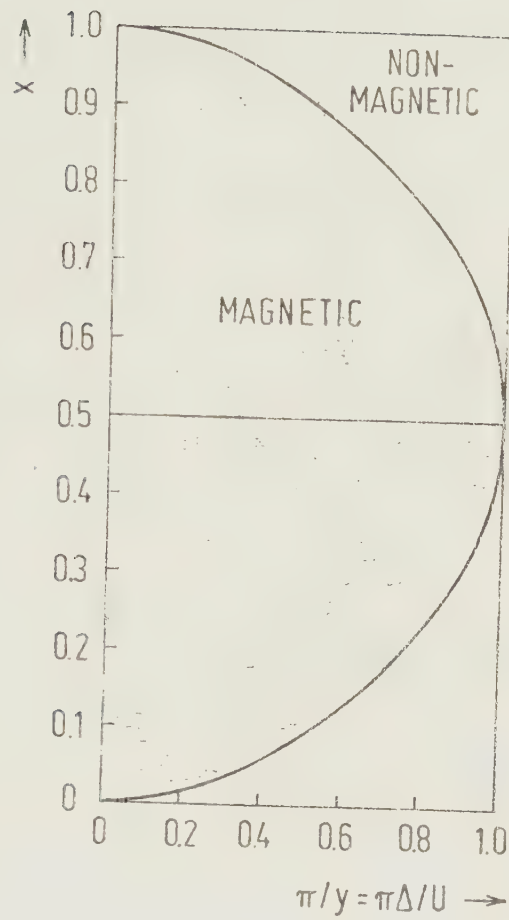
Führt man diese Transformation bis zur gleichen Ordnung aus wie in Abschnitt I., erhält man:

$$c_{k\sigma}^+ = \tilde{c}_{k\sigma}^+ + 2i \sum_{k'\sigma'} (\alpha_{k'\sigma'} \tilde{c}_{k\sigma}^+ \tilde{c}_{k'\sigma'}^+ + \bar{\alpha}_{k'\sigma'} \tilde{c}_{k\sigma}^+ \tilde{c}_{k'\sigma'}) - i \bar{\alpha}_{k\sigma} \\ + \sum_{k'\sigma'} (\bar{\alpha}_{k'\sigma'} \bar{\alpha}_{k\sigma} \tilde{c}_{k'\sigma'}^+ + \alpha_{k'\sigma'} \bar{\alpha}_{k\sigma} \tilde{c}_{k\sigma}^+ - 2 |\alpha_{k'\sigma'}|^2 c_{k\sigma}^+)$$

Bilden wir nun Erwartungswerte, erhalten wir links den gesuchten Wert $\langle c_{k\sigma}^+ \rangle$, während wir auf der rechten Seite die Erwartungswerte mit $\tilde{H}_S^{(1)}$ bilden (so daß nur Erwartungswerte der Form $\langle c_{k\sigma}^+ c_{k\sigma} \rangle$ beitragen) und erhalten unter Verwendung des in II. angegebenen $\alpha_{k\sigma}$:

$$\langle c_{k\sigma}^+ \rangle = \frac{\bar{\gamma}_{k\sigma}}{\epsilon_k - \mu} (2 \bar{n}_{k\sigma} - 1)$$

Abb.1



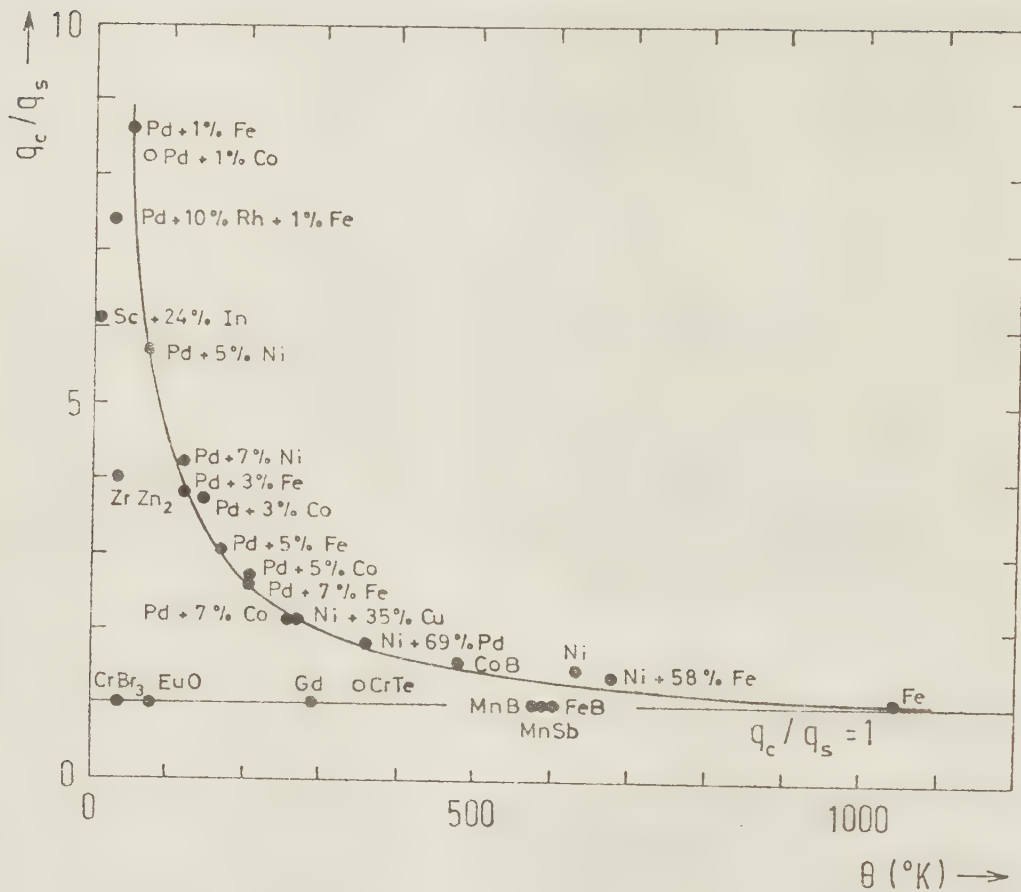
$$x = (\epsilon_F - \epsilon_D) / U$$

$$\Delta = \pi |V| N(\epsilon_F)$$

V ist ein Parameter für die Hybridisierung (aus [52])

Abb.2

Rhodes-Wohlfahrt-plot



Ordinate: q_c/q_s

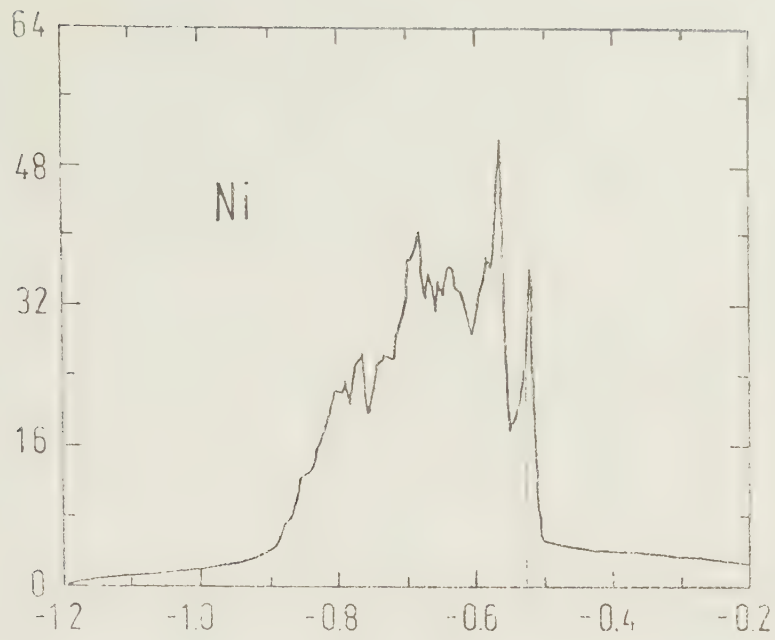
q_c = effektives magnetisches Moment aus dem
Curie-Weiß-Gesetz

q_s = effektives magnetisches Moment aus der
Sättigungsmagnetisierung

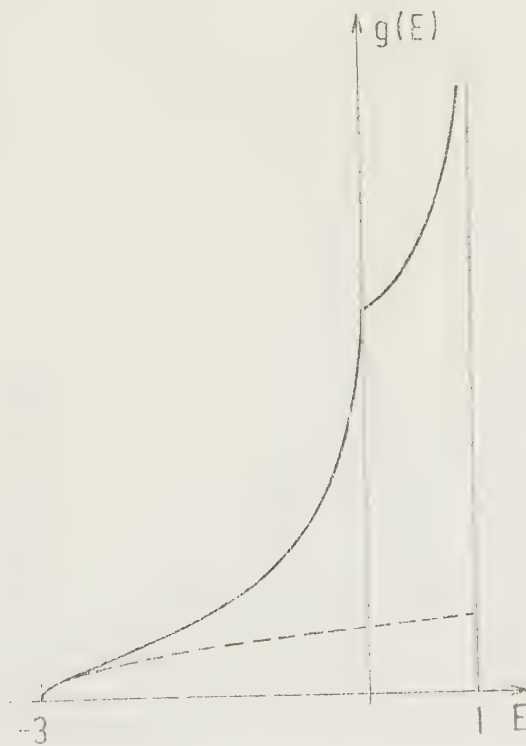
Abszisse = Curietemperatur in Grad Kelvin

(aus [60])

Abb.3a



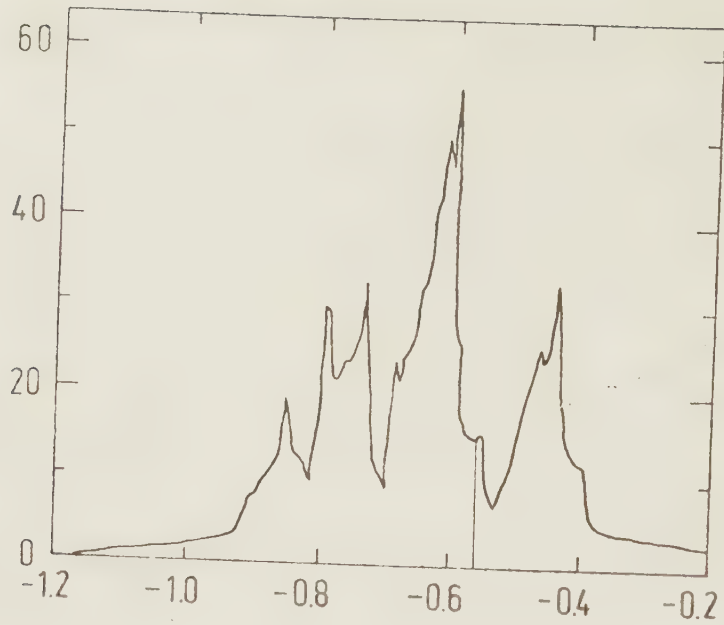
Zustandsdichte für Ni nach Wang und Callaway [80]



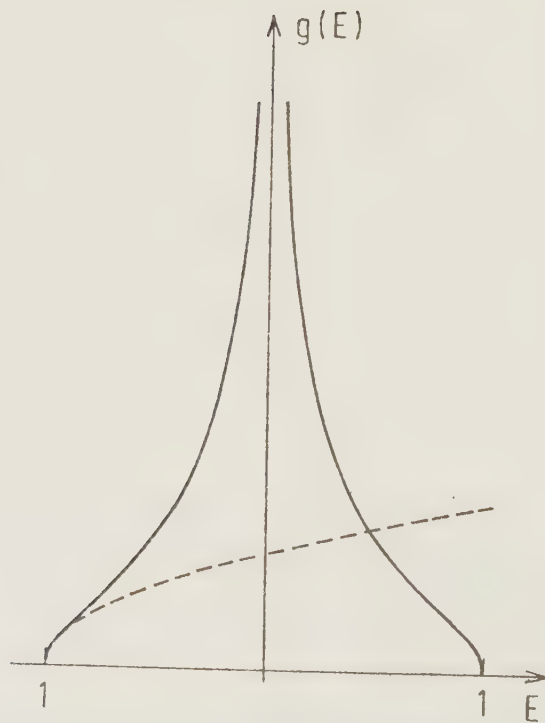
Zustandsdichte für ein fcc-Gitter in der tight-binding-Näherung

(aus [82])

Abb. 3b



Zustandsdichte für Fe nach Wang und Callaway [80]



Zustandsdichte für ein bcc-Gitter in der tight-binding-Näherung [82]

Abb. 4a

$$\Delta E(\varphi)/2 \sin^2 \varphi/2$$

Ni H = 3

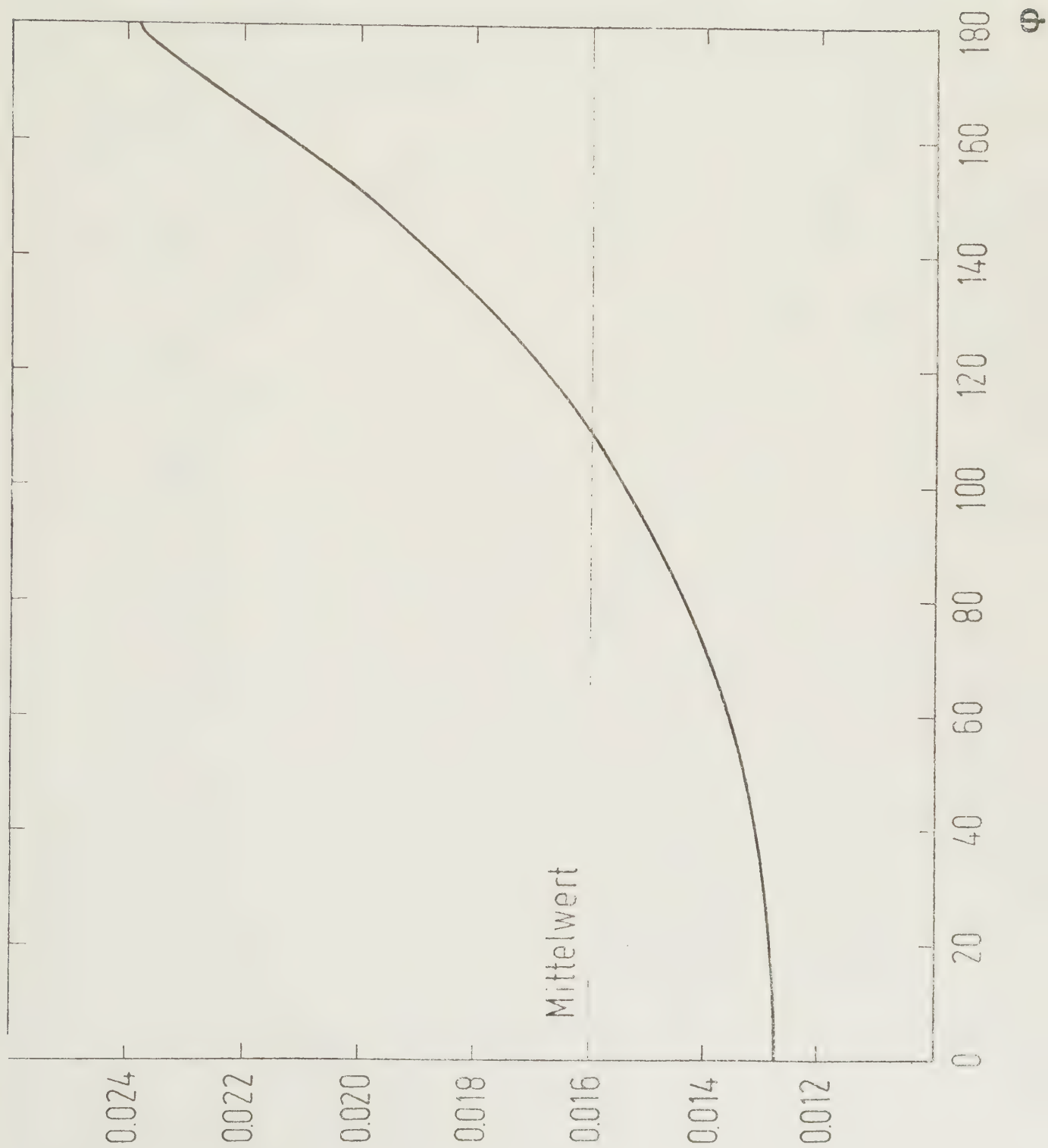
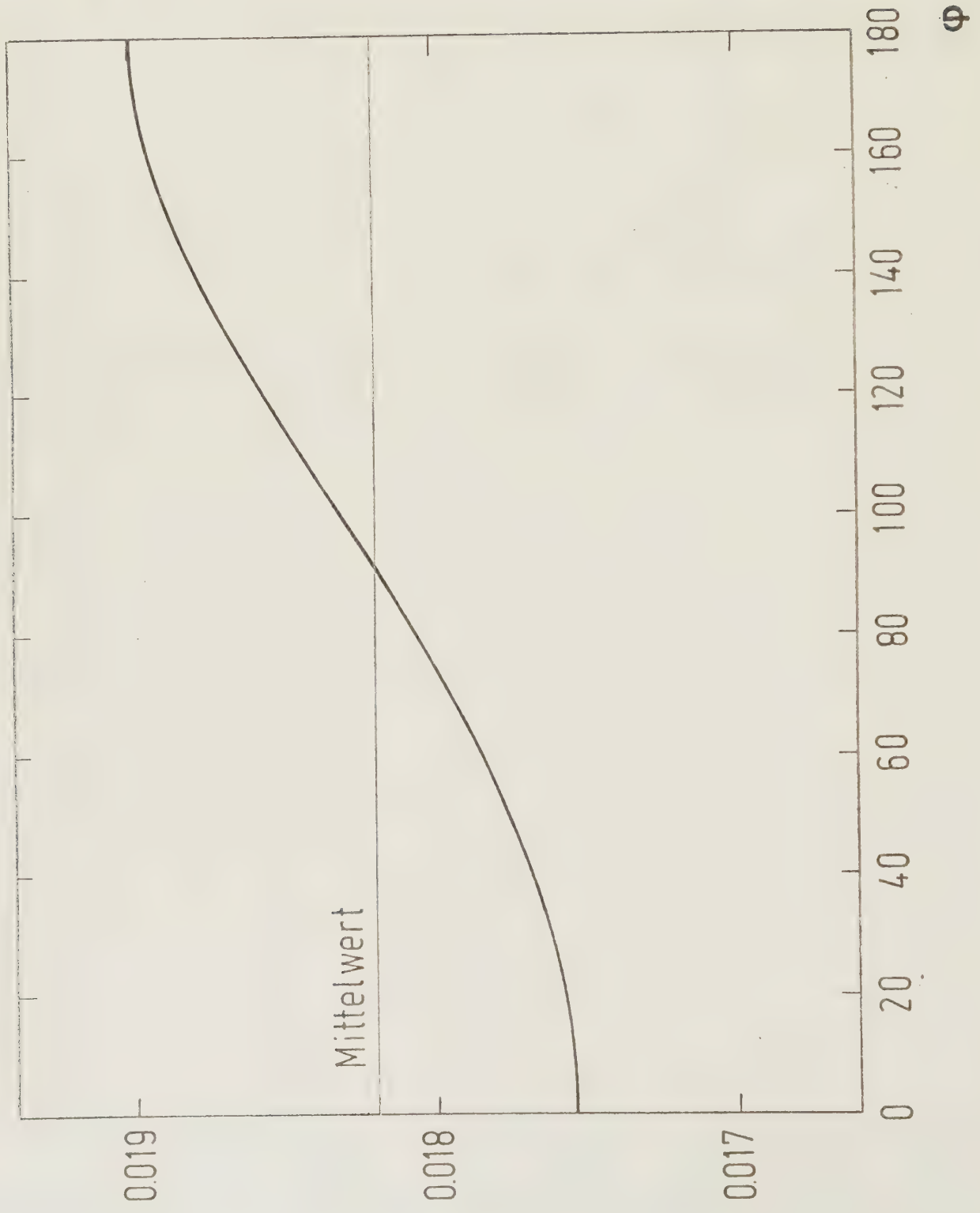


Abb.4b

$$\Delta E(\varphi)/\sin^2 \varphi/2$$

Ni $H=4$



Danksagung

An dieser Stelle möchte ich Herrn Prof. Dr. R.J. Jelitto herzlich danken für die Anregung zu dieser Arbeit und die Möglichkeit, sie bei ihm durchzuführen.

Weiterhin danke ich Herrn Prof. P. Fulde für seine wissenschaftliche Unterstützung, sowie den Herren Prof. Hirst, Dr. A. Oleš und Dr. M. Heise für viele kritische und wertvolle Hinweise.

Literatur:

- [1] W. Heisenberg: Z. f. Phys. 49 (1928) 619
- [2] J.H. van Vleck: The Theory of Electric and Magnetic Susceptibilities, Oxford University Press 1932
- [3] F. Bloch: Z. f. Phys. 57 (1929) 545
- [4] E.C. Stoner: Rep. Progr. Phys. 11, (1947) 43,
J. Phys. Radium 12 (1951) 372
- [5] F. Bloch: Z. f. Phys. 61 (1930) 206
- [6] C. Zener: Phys. Rev. 81 (1951) 440, 83 (1951) 299
- [7] J. Hubbard: Proc. Roy. Soc. A 276 (1963) 238, A 281 (1964) 401
- [8] J. Kanamori: Prog. Theor. Phys. 30 (1963) 275
- [9] M. Gutzwiller: Phys. Rev. 134 (1964) A 923, 137 (1965) A 1726
- [10] P. Anderson: Phys. Rev. 115 (1959) 2
- [11] F. Englert, M.M. Antonoff: Physica 30 (1964) 429
- [12] K. Dichtel, R.J. Jelitto, H. Koppe: Z. f. Phys. 246 (1971) 248, 251 (1972) 173
- [13] M. Heise, R.J. Jelitto: Z. f. Phys. B 25 (1976) 381, B 26 (1977) 177
- [14] C. Cleveland, R. Medina: Am. J. of Physics 44 (1976) 44
- [15] J. Hertz, D. Edwards: Phys. Rev. Lett. 28 (1972) 1334,
J. Phys. F 3 (1973) 2174, 2191
- [16] J. Slater: Phys. Rev. 81 (1951) 385, 82 (1951) 538
- [17] P. Hohenberg, W. Kohn: Phys. Rev. 136 (1964) B 864
- [18] W. Kohn, L. Sham: Phys. Rev. 140 (1965) A 1133
- [19] R. Gaspar: Acta Phys. Hung. 3 (1954) 263
- [20] U. Barth, L. Hedin: J. Phys. C 5 (1972) 1629
- [21] T. Izuyama, D.-J. Kim, R. Kubo: J. Phys. Soc. Japan 18 (1963) 1025

- [22] J. Hertz, M. Klenin: Phys. Rev. B 10 (1974),
Physica 91 B+C (1977) 49
- [23] K.K. Murata, S. Doniach: Phys. Rev. Lett. 29 (1972) 285
- [24] T. Moriya, A. Kawabata: J. Phys. Soc. Japan 34 (1973) 639,
35 (1973) 669
- [25] P. Soven: Phys. Rev. 156 (1967) 809
- [26] B. Velicky, S. Kirkpatrick, H. Ehrenreich: Phys. Rev. 175
(1968) 747
- [27] B. Brandow: Adv. in Physics 26 (1977) 651
- [28] E. Economou, C. White: Phys. Rev. Lett. 38 (1977) 289,
Phys. Rev. B 18 (1978) 3946, 3959, 3968
- [29] H. Hasegawa: J. Phys. Soc. Japan: 46 (1979) 1504, 49 (1980)
178, 963
- [30] J. Hubbard: Phys. Rev. B 19 (1979) 2626, B 20 (1979) 4584,
B 23 (1981)
- [31] T. Moriya, Y. Takahashi: J. Phys. Soc. Japan 45 (1978) 397,
J. de Phys. 39 (1978) C 6-1466
- [32] V. Korenman, J. Murray, R. Prange: Phys. Rev. B 16 (1977)
4032, 4048, 4058, B 19 (1979) 4691, 4698
- [33] H. Capellmann: Z. f. Phys. B 34 (1979), B 35 (1979) 269
- [34] M. Cyrot: Phys. Rev. Lett. 25 (1970) 871,
Phil. Mag. 25 (1971) 1031, J. de Phys. 33 (1972) 125
- [35] M. Cyrot, P. Lacour-Gayet: J. Phys. C 7 (1974) 400,
Solid State Comm. 11 (1972) 1767
- [36] H. Mori, K. Kawasaki: Prog. Theor. Phys. 27 (1962) 529
- [37] H. Mori: Prog. Theor. Phys. 34 (1965) 423
- [38] R. Zwanzig, R. Mountain: J. Chem. Phys. 43 (1965) 4464

- [62] J. Lynn: Phys. Rev. B 11 (1975) 2624
- [63] M. You, V. Heine, A. Holden, P. Lin-Chung: Phys. Rev. Lett. 44 (1980) 1282.
- [64] P. Lin-Chung, A. Holden: Phys. Rev. B 23 (1981) 3414
- [65] L. Landau, E. Lifschitz: Physik.Z. Sowjetunion 8 (1935) 153
- [66] V. Korenman, R. Prange: J. Appl. Phys. 50 (1979) 1779
- [67] J. Smart: Effective Field Theories in Magnetism, W.B. Saunders Philadelphia 1965
- [68] G. Pratt, L. Caron: J. Appl. Phys. 39 (1968) 485, Rev. Mod. Phys. 40 (1968) 802
- [69] S. Doniach, E. Sondheimer: Green's Functions for Solid State Physicists, W.A. Benjamin Inc., Reading 1974
- [70] D. Esterling: Phys. Rev. B 2 (1970) 4686
- [71] V. Kapustin: Sov. Solid State 16 (1974) 520
- [72] Y. Nagaoka: Phys. Rev. 147 (1966) 392
- [73] J. Monecke: phys. stat. sol. b 57 (1973) K 21, b 65 (1974) 231, b 74 (1976) K 57
- [74] W. Steeb, E. Marsch: phys. stat. sol. b 69 (1975) K 149
- [75] D. Mattis: The Theory of Magnetism, Harper & Row, New York 1965
- [76] E.P. Wohlfarth in: Ferromagnetic Materials 1 (E.P. Wohlfarth, ed.), North Holland Publishing Co., Amsterdam 1980
- [77] U. Gerhardt, C.J. Maetz, A. Schütz, E. Dietz: J. Magn. Mat. 15-18 (1980) 1141
- [78] R. Tawil, J. Callaway: Phys. Rev. B 7 (1972) 4242
- [79] O. Gunnarsson: J. Phys. F 6 (1976) 587
- [80] J. Callaway, C. Wang: Phys. Rev. B 15 (1977) 298, B 16 (1977) 2095
- [81] O. Andersen, O. Jepsen: Physica 91 B (1977) 317

- [39] D. Forster: Hydrodynamic Fluctuations, Broken Symmetry, and Correlation Functions, W.A. Benjamin Inc., 1975
- [40] R. Stratonovich: Sov. Phys. Dokl. 2 (1958) 416
- [41] J. Hubbard: Phys. Rev. Lett. 3 (1959) 77
- [42] D. Zubarev: Fortschr. d. Physik 9 (1961) 275
- [43] P. Anderson: J. Phys. Soc. Japan 9 (1954) 316
- [44] R. Kubo: J. Phys. Soc. Japan 9 (1954) 316
- [45] D. Pines: The Many-Body Problem, W.A. Benjamin Inc., New York 1963
- [46] D. Pines: Elementary Excitations in Solids, W.A. Benjamin Inc., New York 1963
- [47] A.W. Overhauser: Phys. Rev. B 3 (1971) 1888
- [48] R. Tahir-Kheli: Phys. Rev. 132 (1963) 689
- [49] J. Zittartz: Z. f. Phys. 184 (1965) 506
- [50] D. Bohm, D. Pines: Phys. Rev. 92 (1953) 609
- [51] S. Liu: Phys. Rev. B 15 (1977) 4281, B 17 (1978) 3629
- [52] P. Anderson: Phys. Rev. 124 (1961) 41
- [53] J. Schrieffer, P. Wolff: Phys. Rev. 149 (1966) 491
- [54] M. Sakoh, D. Edwards: Phys. stat. sol. b 70 (1975) 611
- [55] D. Edwards: J. Magn. Magn. Mat. 15-18 (1980) 262
- [56] M.B. Stearns: physics today, April 1978
- [57] R. Haydock, V. Heine, M. Kelly: J. Phys. C 8 (1975) 2591, Solid State Physics Vol. 35 (ed. F. Seitz, D. Turnbull, H. Ehrenreich), Academic Press, New York 1980
- [58] A. Aldred, P. Froehle: Int. J. Magn. 2 (1972) 195
- [59] A. Aldred: Phys. Rev. B 11 (1975) 2597
- [60] P. Rhodes, E.P. Wohlfarth: Proc. Roy. Soc. A 273 (1963) 247
- [61] H. Mook, J. Lynn, R. Nicklow: Phys. Rev. Lett. 30 (1973) 556

- [82] R.J. Jelitto: J. Phys. Chem. Solids 30 (1969) 609
- [83] G. Grawert: Quantenmechanik, Akad. Verlagsgesellschaft,
Frankfurt am Main 1969
- [84] M. Tinkham: Group Theory and Quantum Mechanics, Mc Graw-Hill,
New York 1964
- [85] R.M. White: Quantum Theory of Magnetism, Mc Graw-Hill,
New York 1971
- [86] D.E. Eastman, F.J. Himpsel, J.A. Knapp: Phys. Rev. Lett. 44
(1980) 95
- [87] R. Tahir-Kheli, D. ter Haar: Phys. Rev. 127 (1962) 88
- [88] H. Callen: Phys. Rev. 130 (1963) 890
- [89] H.A. Brown, J.M. Luttinger: Phys. Rev. 100 (1955) 685
- [90] C. Domb, M.F. Sykes: Phys. Rev. 128 (1962) 168
- [91] T. Moriya: J. Magn. Magn. Mat. 14 (1979) 1
- [92] L. Roth: Phys. Rev. Lett. 20 (1968) 1431,
Phys. Rev. 184 (1969) 451
- [93] C.J. Maetz, U. Gerhardt, E. Dietz, A. Ziegler, R.J. Jelitto:
erscheint in Phys. Rev. Lett.
- [94] V. Korenman, R.E. Prange: Phys. Rev. Lett. 44 (1980) 1291

Lebenslauf

- 16.11.1950 geboren in Frankfurt a.M.
Eltern: Kurt Ziegler und Adeline Ziegler, geb. Winter
- Ostern 1957 Einschulung in die Ludwig-Erk-Schule, 607 Langen
- Ostern 1961 Übergang auf die Dreieichschule, Gymnasium, 607 Langen
- Ostern 1966 Wahl des mathematisch-naturwissenschaftlichen Zweiges
- 3.6.1969 Abitur
- 6.10.1969 Studium der Mathematik und Physik an der Johann-Wolfgang-Goethe-Universität Frankfurt a.M.
- 22.10.1970 Vordiplom Physik
- 4.11. 1970 Vordiplom Mathematik
- 1.3.-12.3.71 Ferienkurs an der KFA Jülich: "Elektronen in Metallen"
- 8.4.-26.7.71 Sommerschule "Ettore Majorana" in Erice, Sizilien
"Properties of the Fundamental Interactions"
- 21.5.75 Diplom in Mathematik
Titel der Arbeit:
"Die Kohärenz der Bildgarbe bei q -pseudokonvexen Abbildungen"

Meine akademischen Lehrer waren die Professoren:

Bauer, Burde, Constantinescu, Dinges, Dreizler, Fulde, Greiner, Haug, Hirst, Jelitto, Kerner, Kiehl, Köthe, Kulze, Martienssen, Schnakenberg, Schwarz, Thomas, Weidmann.

